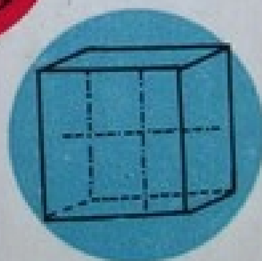
FIZICA CRISTALELOR

I.I. SIROTIN • M.P. ŞASKOLSKAIA







EDITURA
ŞTIINŢIFICĂ
ŞI ENCICLOPEDICĂ

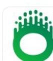
I. I. SIROTIN • M. P. ȘASKOLSKAIA

FIZICA CRISTALELOR

În românește de VIRGIL SPULBER

CUPRINS





PREFAȚĂ

Editura științifică și enciclopedică ne oferă spre studiu și aprofundare una dintre cele mai complexe monografii sovietice dedicate fizicii corpului solid. Ea vine să completeze, în mod fericit, eforturile unor creații românești (G. Mastacan, *Cristale, minerale, roci*, 1967, Al. Codarcea, *Mineralogia*, vol. I, *Cristalografia*, 1965), sau ale unor traduceri (capitol separat în Ch. Kittel, *Introducere în fizica corpului solid*, 1972, sau lucrarea consacrată integral, I.S. Jeludev, *Simetria și aplicațiile ei*, 1979).

Departe de a fi aridă din punct de vedere matematic, această carte nu ne „înduioșează" însă cu aplicații practice directe, dar ne ajută, pe cei ce lucrăm sau învățăm, în acest domeniu, să vedem cît de vastă este cunoașterea umană pe tărîmul științei și al practicii fizicii cristalelor. De la bun început, vom preciza faptul că autorii se referă numai la acest domeniu al fizicii solidului, domeniu în care proprietățile fizice pot fi descrise cu ajutorul unor legi de simetrie. Cristalele își au aplicații în domenii de vîrf ale tehnologiei epocii noastre. Cine va căuta aplicarea modelelor analizate pentru fenomenele care au loc în materialele necristaline (amorfi, sticle și polimeri solizi) va întîmpina dificultăți de ordin principial, dificultăți care decurg din însăși vastitatea domeniului abordat. Credem, trebuie precizat, că înțelegerea mai complexă a unor astfel de materiale nu se poate realiza fără cunoașterea fenomenelor ce au loc în structuri mai simple, mai „curate", adică mai lipsite de defecte, cum sînt monocristalele crescute din substanțe pure. Este evident că o asemenea fizică pare a fi o fizică de laborator, similară, într-un anumit mod, rețetei farmaceutice. Dar fără cunoașterea fenomenelor de bază care au loc în monocristale, materiale care posedă ordine la distanță mare, nu ne putem apropia cu înțelegerea de fenomenele care au loc în materialele care se „abat" de la această structură pură (nu și ideală) pînă la o anumită treaptă, deoarece și ea se dovedește a fi imperfectă pe alte niveluri, cum ar fi dezordinea produsă de oscilațiile rețelei.

Cartea de față expune, pe parcursul a 10 capitole, 187 figuri, 114 tabele și 300 citări bibliografice, o analiză (care în multe locuri este și foarte atractivă) a problemelor generale ale simetriei

cristalelor și, în legătură cu ele, a corelațiilor dintre această simetrie și proprietățile fundamentale ale cristalelor : proprietăți electrice, termice, optice, magnetice precum și probleme generale cum ar fi cele ale termodinamicii cristalelor și legătura cu unele capitole de matematici superioare.

Teoria și practica cunoașterii proprietăților fizice ale cristalelor au condus la dezvoltarea tehnicilor de creștere a monocristalelor cu proprietăți speciale, al căror corolar a fost nașterea unor domenii noi, aplicative, legate în special de electronică. Menționăm în acest context sintetizarea de noi materiale semiconductoare, magnetice și dielectrice, nașterea și dezvoltarea electronicii cuantice, a optoelectronicii, crearea de noi tipuri de dispozitive cum ar fi detectorii în infraroșu, dispozitivele piezoelectrice, memoriile magnetice și dielectrice ş.a.

Vastitatea domeniului abordat ca și maniera în care a fost scrisă oferă cărții de față un caracter de manual, în sensul tratării detaliate a problemelor, dar și un caracter monografic, în sensul dezvoltării unor idei de către școala sovietică de fizica cristalelor al cărei fondator a fost A. V. Șubnikov.

Înainte de a efectua o trecere în revistă a conținutului dorim să precizăm că această carte se adresează absolvenților de învățămînt superior și studenților care sînt familiarizați cu matematicile superioare (calcul diferențial și integral), pot stăpîni în special calculul tensorial și cunosc elementele de bază ale teoriei grupurilor. Vom menționa, de asemenea, că, spre surprinderea noastră, autorii nu folosesc în cea mai mare parte a lucrării unitățile de măsură din sistemul internațional (SI), ci, dimpotrivă, utilizează așa-zisele sisteme „neortodoxe".

În continuare, vom expune, pe scurt, conținutul capitolelor lucrării fără a intra în detalii, urmînd a semnala acele elemente care constituie esența secțiunilor.

În capitolul întîi sînt prezentate noțiunile fundamentale de cristalografie, cum sînt rețeaua cristalină, elementele și operațiile de simetrie, grupurile de simetrie (punctuale și spațiale), rețeaua directă și rețeaua reciprocă, indicii elementelor cristaline și transformarea lor la schimbarea sistemului de coordonate. Sînt de semnalat cîteva aspecte interesante. Astfel, după N. V. Belov, deși axa de ordinul cinci nu este posibilă în cristale, ea poate exista în structuri biologice, acest fapt reflectînd un mijloc al lor de luptă pentru existență, împotriva „cristalizării" (pietrificării). O noțiune importantă o constituie dreapta polară (în cristale fără centru de simetrie), care posedă proprietăți diferite pentru sensuri diferite (cum ar fi, de exemplu, polarizarea spontană în feroelectrici).

În capitolul al doilea sînt analizate sistemele de coordonate folosite, transformările ortogonale, vectorii și tensorii de ordinul al doilea.

Capitolul al treilea conține analiza proprietăților electrice și termice ale cristalelor în corelație cu simetria. În prima parte sînt scrise ecuațiile electrostaticii cristalelor și expresiile cîmpului electric în cavități pentru sarcini punctiforme și pentru dipoli. Este expusă, de asemenea, o analiză fenomenologică a efectului piroelectric, a curentului electric continuu și a conductibilității termice. Dintre noțiunile importante analizate menționăm suprafața oricărei proprietăți (dilatarea termică, difracția radiațiilor Röntgen, proprietățile optice), principiul general de simetrie (principiul lui Curie). O caracteristică importantă a simetriei generale a cristalelor este aceea că elementele de simetrie ale cauzelor trebuie să existe și în efectele provocate, dar afirmația reciprocă nu este corectă, în sensul că efectele pot avea o simetrie mai ridicată decît cea a cauzelor.

Cîteva proprietăți optice ale cristalelor transparente ($\sigma = 0$) sînt tratate în capitolul al patrulea : propagarea undelor electromagnetice și construirea indicatricei optice, care, la rîndul ei, ajută la stabilirea vitezei de propagare în medii anizotrope, construirea suprafețelor caracteristice pentru tensorii permitivității dielectrice și ai indicelui de refracție, dubla refracție în cristalele uniaxe cu aplicații pentru o serie de cristale : cuarț, rubin, rutil, ADP, KDP, topaz, sarea Seignette (sarea Rochelle), refracția conică, proprietățile optice ale cristalelor anizotrope în lumină polarizată.

Capitolul al cincilea este consacrat unor probleme de matematică privind simetria tensorilor de rang superior (tensori și pseudotensori de rangul al treilea și al patrulea), simbolistica tensorilor, operații diferențiale invariante, reprezentări, coordonate ciclice.

În capitolul al șaselea, consacrat studiului elasticității cristalelor, sînt prezentate noțiunile de bază din acest domeniu (tensorul deformărilor mici, tensorul rotațiilor mici, tensorul tensiunilor), legea generalizată a lui Hooke, simetria proprietăților elastice ale cristalelor, deformări statice (după o direcție, forfecarea, încovoierea, torsionarea), tensiunile termice și undele elastice. În această ultimă parte a secțiunii sînt discutate o serie de fenomene interesante, cum ar fi refracția conică în acustică precum și unele noțiuni introduse mai recent : a) suprafața de refracție (F. I. Fiodorov, 1965), b) existența a cinci tipuri de unde și nu trei tipuri (două transversale și una longitudinală) așa cum era bine stabilit.

Obiectul capitolului al șaptelea îl constituie studiul energiei interne și al potențialului termodinamic al cristalelor și matricea lui, care are ca elemente derivatele de ordinul al doilea (coeficienți cunoscuți : capacitatea calorică, componentele tensorului permiti-

vităţii dielectrice, coeficienţii elastici, coeficienţii piroelectrici etc., cu excepţia coeficienţilor legaţi de proprietăţile magnetice). Coeficienţii magnetici sînt analizaţi separat în capitolul următor. În acest capitol mai sînt descrise şi unele efecte speciale : efectele electrocaloric şi piezocaloric. Cea mai însemnată parte a acestui capitol este destinată analizei efectului piezoelectric : legătura dintre clasele cristaline şi clasele piezoelectrice (modificarea tensorului Christoffel şi deci şi a vitezelor de propagare). Tot în acest capitol sînt analizate şi unele aspecte ale tranziţiilor de fază : schimbarea simetriei cristaline în tranziţiile de fază de speţa a doua (ca exemplu este prezentat pe larg titanatul de bariu), modificările proprietăţilor fizice în urma acestor tranziţii (căldura specifică, coeficientul de dilatare, coeficienţii piroelectrici şi piezoelectrici, permitivitatea dielectrică etc.).

Simetria magnetică este analizată separat, în capitolul al optulea. Problemele principale abordate sînt următoarele : inversia temporală şi antisimetria, grupurile spaţiale ale simetriei magnetice (grupuri Şubnikov), efectele piezomagnetic şi magnetoelastic, existenţa unor efecte speciale (piromagnetic, piezomagnetic, magnetocaloric, efectul magnetoelastic direct şi invers).

Capitolul al nouălea este consacrat efectelor de ordin superior, efecte neliniare, care pot fi studiate prin considerarea termenilor de gradul al treilea din dezvoltarea potenţialului termodinamic. Astfel de efecte sînt electrostricţiunea, efectul piezoelectric pătratic, efectul piezorezistiv, pus în evidenţă pe unele metale şi semiconductori, efectele termogalvanomagnetice (efectul Hall, efectul Righi-Leduc, efectul Nernst-Ettingshausen), efectele electrooptic şi piezooptic. Alte probleme specifice opticii cristalelor sînt legate de anizotropia optică artificială a cristalelor (modificarea indicatricei sub efectul acţiunilor externe — cristale uniaxe şi biaxe artificiale, polarizarea neliniară, care apare în condiţiile propagării undelor electromagnetice intense, generate de laseri de mare putere), activitatea optică a cristalelor, manifestată prin dispersie, dubla refracţie, polarizarea eliptică ş.a. Trebuie neapărat menţionate efectele neliniare acustice, care sînt analogul celor optice, cum sînt rotirea planului de polarizare, polarizarea undelor elastice prin propagarea în medii piezoelectrice etc.

În ultimul capitol, al zecelea, sînt schiţate unele probleme generale ale fizicii cristalelor : sarcinile fizicii experimentale a cristalelor (stabilirea de corelaţii între distribuţia parametrilor cristalelor şi condiţiile de preparare), probleme teoretice cu caracter aparent abstract (compararea proprietăţilor tensoriale ale cristalelor, alegerea sistemelor de coordonate cristalografice şi cristalofizice), divergenţe în problema standardizării notaţiilor,

în care autorii arată că standardele din 1949 (*IRE Standards*) prezintă unele nepotriviri față de descoperirile ulterioare.

Cartea se încheie cu cîteva anexe referitoare la sistemele de coordonate cristalografice și cristalofizice, la raportul dintre rețelele Bravais și matricele cristalografice, la proprietățile direcționale ale cristalelor, la operațiile de simetrie, la probleme de invarianță a tensorilor, la tipuri de tensori de material și la forma contrasă de scriere, totul terminîndu-se prin uzuala listă de notații folosite.

Constatînd această eflorescență de informații nu se poate neglija efortul traducătorului în alegerea unor termeni în limba română, pentru care există încă suficiente controverse, sau reconvertirea unor nume de autori care nu sînt citați în original, ceea ce a necesitat o intensă muncă de documentare. Vom menționa în acest sens noțiunea de feroelectricitate (și implicit numele de sare Rochelle). În literatura sovietică și în cea de limbă germană noțiunea are ca punct de plecare sarea Seignette și de aici termenii de „seignettoelectricitate'' și „antiseignettoelectricitate'', în timp ce în literatura de limbă engleză acești termeni descriu structuri ordonate, sub denumirea de „feroelectricitate'' și „antiferoelectricitate''. Este sigur însă că nu aceste controverse vor pune probleme cititorilor interesați, ci răbdarea lor în a parcurge o carte cu adevărat utilă în profesiunea lor actuală și viitoare, indiferent de înclinarea personală spre știința aplicativă sau cea fundamentală a fizicii cristalelor.

Lector dr. I. Bunget

CUVÎNT ÎNAINTE

În ultimii 15 — 20 de ani fizica experimentală a cristalelor, depășind cadrul academic al unui număr restrîns de laboratoare de cercetări, a pășit în domeniul vast al practicii. Au apărut științe și tehnici noi, care se dezvoltă impetuos, așa cum sînt electronica cuantică, optica cuantică și optica neliniară, construcția de dispozitive cu semiconductori, tehnica piezoelectrică, acustica și altele; toate acestea sînt legate de utilizarea monocristalelor și a proprietăților lor deosebite și originale precum și de aplicațiile unor noi fenomene din fizica cristalelor, ale căror descoperiri se succed în prezent în lanț. Aceste fapte au generat necesitatea unor noi cărți de fizică a cristalelor. Nu este întîmplător succesul în țara noastră a manualului lui Nye (1967), a cărui versiune în limba rusă a reușit să apară, în scurt timp, în două ediții. Este totuși nevoie, pe lîngă cartea lui Nye, desigur, și de o lucrare mai completă și mai detaliată, chiar dacă ar fi mai puțin utilă acelora care abordează pentru prima dată această disciplină.

După părerea autorilor, această monografie trebuie să joace tocmai un asemenea rol. La elaborarea ei autorii s-au străduit să îmbine tratarea fizică cu cea bazată pe teoria simetriei, care este proprie școlii sovietice de fizica cristalelor, fundamentată de A. V. Șubnikov. Autorii și-au dat toată silința, pe măsura capacității lor, să aplice și să dezvolte ideile lui A. V. Șubnikov de-a lungul întregii cărți.

Această carte a fost elaborată pe baza cursurilor și seminariilor de cristalografie și fizică a cristalelor, ținute de autori la Institutul oțelului și aliajelor din Moscova și la Facultatea de fizică a Universității de stat din Moscova; ea a fost concepută, în primul rînd ca manual. Anumite particularități, specifice unui manual, în primul rînd tratarea amănunțită și o anumită redare elementară, au fost păstrate și în forma finală. Din această cauză nu există o listă completă a bibliografiei; autorii nu au încercat să dea o listă exhaustivă a publicațiilor referitoare la diferite capitole ale fizicii cristalelor, ci au menționat doar anumite articole, caracteristice pentru aceste capitole, cît și cărțile care permit inițierea în respectivul capitol, considerat de-sine-stătător.

Intenţionat nu sînt incluse în monografie cristalografia structurală şi cristalochimia, proprietăţile structural-sensitive, defectele şi creşterea cristalelor. De asemenea, atît volumul cărţii cît şi stilul expunerii nu au permis să fie incluse descrierea metodelor de măsurare şi exemplele de aplicare practică ale proprietăţilor fizice descrise ale cristalelor. Apariţia relativ recentă a unei culegeri de probleme de fizica cristalelor, sub redacţia unuia dintre autori (Perelomova şi Taghiev, 1972), a permis ca problemele să nu fie incluse în lucrare.

Dintre principiile cristalografiei geometrice au fost expuse numai capitolele necesare pentru fizica cristalelor; s-au avut în vedere aici cunoscutele prelegeri ale academicianului N. V. Belov (1957, 1968), relative la cursul de cristalografie pentru fizicieni.

Din bogatul material al calculului tensorial au fost alese, de asemenea, numai acele probleme care sînt importante pentru fizica cristalelor; unele dintre ele aproape că nu sînt tratate în literatura ştiinţifică existentă. Împreună cu scrierea prin coordonate (indexată) a relaţiilor tensoriale, în lucrare este utilizată şi scrierea fără indici, ceea ce permite cititorului să evalueze singur care dintre ele este mai potrivită în fiecare caz concret în parte. Notaţiile utilizate de diferiţi autori în scrierea fără indici gravitează în jurul a două tipuri: unul dintre ele este folosit, de exemplu, în monografiile lui F. I. Fiodorov (1958, 1965), iar celălalt, iniţiat încă de Gibbs, este utilizat în cursul lui Borisenko şi Tarapov (1966) şi în monografiile lui Lure (1955, 1970). Aici sînt folosite notaţiile de tipul al doilea, ele fiind potrivite nu numai pentru tensorii de rangul doi, ci şi pentru tensorii de rang mai înalt. În carte nu este tratată teoria grupurilor, deoarece ea se aplică numai în cîteva cazuri în care evitarea acestei teorii a fost imposibilă.

În expunerea fizicii cristalelor se subliniază influenţa simetriei şi disimetriei cristalelor asupra proprietăţilor lor fizice fundamentale şi în special asupra anizotropiei acestor proprietăţi. Trebuie ţinut cont că din acest punct de vedere apar analoage proprietăţi care, în alte privinţe, sînt complet deosebite (de exemplu, difuzia şi permitivitatea, magnetostricţiunea şi efectul piezooptic). Descrierea anizotropiei uneia dintre proprietăţi este aplicabilă în mare măsură şi altei proprietăţi, cel puţin calitativ. În ceea ce priveşte însă caracteristicile cantitative ale anizotropiei, acestea diferă mult, atît de la o proprietate la alta, cît şi de la o substanţă la alta. Datele corespunzătoare pot fi găsite în unele îndreptare, ca de exemplu Landolt-Boernstein (1966, 1969, 1971), Krishnan (1958), Voronkova, Greciuşnikov, Distler, Petrov (1965), şi în articolele de sinteză, după care au fost întocmite tabelele ilustrative ale constantelor de material ale cristalelor, incluse în

această lucrare, care permit cititorului să-și dea seama de mărimea efectului și de anizotropia lui.

Pentru o prezentare mai intuitivă a anizotropiei proprietăților fizice ale cristalelor, în carte sînt cuprinse desenele explicative: suprafețele tensorilor, secțiunile și proiecțiile lor stereografice. Unele dintre ele sînt luate din literatură, iar altele sînt calculate și realizate sub conducerea unuia dintre autorii Ș. M. Butabaev și L. G. Ianusova cu sprijinul lui P. L. Rubin (lui Ș. M. Butabaev îi aparțin figurile 24.2, 24.11, 47.5,a, 54.3, 54.10, 58.2, 58.3, 81.2, iar lui L. G. Ianusova figurile 44.1, 47.2, 47.3, 47.4, 47.5, b, 47.6, 54.4, 54.5, 54.6, 54.8, 56.4). Autorii le exprimă sincere mulțumiri pentru volumul mare de muncă și deloc ușoară, care a contribuit atît de mult la îmbunătățirea acestei cărți.

Pentru demonstrarea anizotropiei proprietăților fizice ale cristalelor, ca exemplu de referință au fost alese proprietățile elastice, în virtutea faptului că ele sînt relativ simple și bine studiate. În practica teoriei elasticității s-a luat drept caracteristică principală a deformării nu vectorul deplasare, ci tensorul deformării; aceasta permite să se scurteze expunerea și să se scoată în evidență analogia dintre ecuațiile fundamentale ale electrostaticii și cele ale elastostaticii.

Optica cristalelor este redată pe scurt și în cea mai mare parte clasic. Tot pe scurt este expusă și acustica cristalelor, cu atît mai mult cu cît ei îi sînt consacrate două monografii excelente (F.I. Fiodorov, 1965; Musgrave, 1970). Simetria și topologia suprafețelor de undă este ilustrată folosind materialul grafic selecționat din periodicele științifice.

În prima jumătate a capitolului 7 este examinat, din punct de vedere termodinamic, sistemul legăturilor dintre fenomenele termice, electrice și elastice din cristale, piezoelectricitatea fiind considerată drept cea mai importantă manifestare a acestor legături. Cea de a doua jumătate a acestui capitol este consacrată aspectelor de simetrie a teoriei lui L. D. Landau a tranzițiilor de fază de speța a doua. Nouă din punct de vedere metodic este descrierea unitară a tuturor tranzițiilor de fază posibile, cu dubla schimbare a simetriei (§ 65), care arată că în limitele de aplicabilitate a teoriei, toate modificările proprietăților cristalului în cadrul tranziției de fază sînt determinate de grupurile de simetrie de fază, legate între ele prin această tranziție de fază. În § 66 se examinează variațiile posibile ale simetriei cristalului în cadrul tranziției (de fază); odată cu prezentarea lucrărilor clasice, aici sînt sintetizate și unele lucrări recente.

Capitolul 8, nu prea întins, este consacrat aplicației antisimetriei și simetriei magnetice în fizica cristalelor. Proprietățile mag-

netice ale cristalelor sînt analizate aici numai în măsura în care ele apar ca o manifestare a simetriei magnetice specifice.

În capitolul 9 este examinată succint o întreagă gamă de diferite efecte de ordin superior: mai întîi cele legate de luarea în considerare a termenilor de ordin superior din ecuaţiile de material (elasticitatea neliniară, efectul piezorezistiv, efectul termogalvanomagnetic, efectul piezoelectric, efectul electrooptic, susceptibilitatea dielectrică neliniară), iar după aceasta, cele datorate dispersiei spaţiale (activitatea optică şi activitatea acustică). În măsura în care este necesar se utilizează şi aici simetria magnetică (§ 76, § 82).

Rezolvarea unor probleme generale ale fizicii cristalelor, care constituie conţinutul capitolului 10, este necesară pentru utilizarea în practică a oricăreia dintre proprietăţile fizice anizotrope ale cristalelor.

În anexe este cuprins mai ales materialul informativ care se referă simultan la mai multe secţiuni ale cărţii.

Autorii au elaborat împreună planul şi au analizat conţinutul tuturor secţiunilor cărţii, încît în multe locuri devine dificilă delimitarea aportului fiecăruia dintre ei. Capitolele 1, 3 şi 4 au fost scrise cu precădere de M. P. Şaskolskaia, iar restul mai ales de către I. I. Sirotin.

Autorii aduc mulţumiri lui S. A. Ahmanov, L. K. Zarembo, V. A. Koptik, V. K. Semencenko, M. M. Umanski, cu care au discutat fiecare secţiune a cărţii; aduc, de asemenea, mulţumiri lui V. A. Frank-Kameneţki, V. A. Bokov şi V. N. Rojanski, care şi-au asumat munca de recenzare a cărţii. Autorii mulţumesc foştilor lor studenţi, E. Bartenev, N. Voropaev, S. Orlov, G. Titov şi V. Şcerbakov, care le-au pus la dispoziţie conspectele lor, efectuînd şi unele calcule. Observaţiile asupra cărţii, indicarea neajunsurilor şi greşelilor vor fi primite de autori cu recunoştinţă.

I. I. Sirotin, M. P. Şaskolskaia

CAPITOLUL 1

NOȚIUNI FUNDAMENTALE DIN CRISTALOGRAFIE

§ 1. STRUCTURA CRISTALULUI ȘI REȚEAUA SPAȚIALĂ

„Cristalografia este o ramură a științei care are ca scop descrierea și interpretarea structurii și a proprietăților stărilor condensate ale substanței și a legăturii acestora cu conexiunile spațiale ale atomilor și ale forțelor dintre atomi" (Crystallographic Book List, 1965)*.

Conexiunile spațiale ale atomilor și ale forțelor dintre atomi caracterizează gradul de perfecțiune, ordinea și simetria structurii interne a cristalului. Particulele din care sînt formate cristalele (adică atomii, ionii, moleculele, complecșii) sînt dispuse ordonat și simetric în spațiu în șiruri plane, în rețele. Ca urmare a ordinii

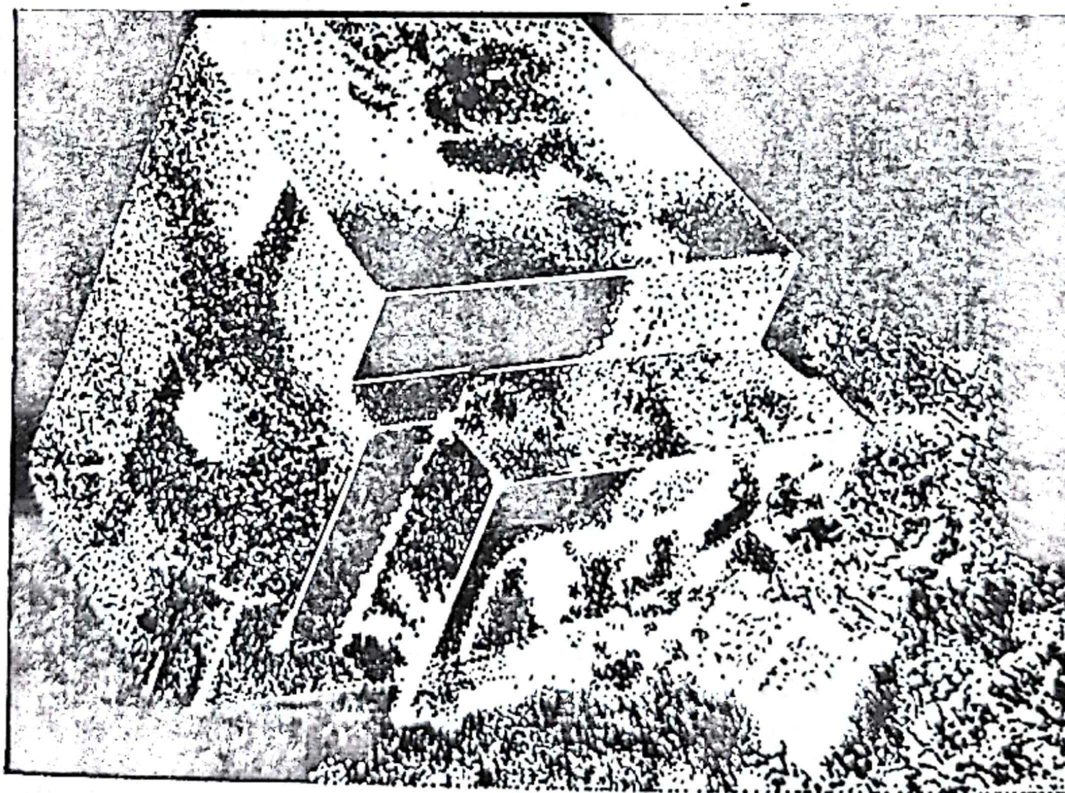


Fig. 1.1. Poliedru natural de sare gemă.

și simetriei structurii interne, sînt simetrice și proprietățile fizice ale cristalelor, sînt simetrice și formele lor poliedrice exterioare (fig. 1.1).

* Bibliografia se află la sfîrșitul cărții, p. 752.

Ordinea și simetria structurii unui cristal sînt consecințe ale echilibrului dinamic al unui mare număr de forțe și de procese. Acțiunile exterioare, cum ar fi, de pildă, cîmpul electric sau cîmpul magnetic, solicitarea mecanică sau adaosul de atomi străini în cristal, pot perturba întrucîtva acest echilibru dinamic; în consecință, se modifică corespunzător și proprietățile cristalului. Acest fapt permite o gamă largă de posibilități de a modifica după dorință proprietățile cristalelor utilizate în tehnică.

Consecințele ordinii și simetriei structurii sînt omogenitatea, discontinuitatea și anizotropia cristalelor.

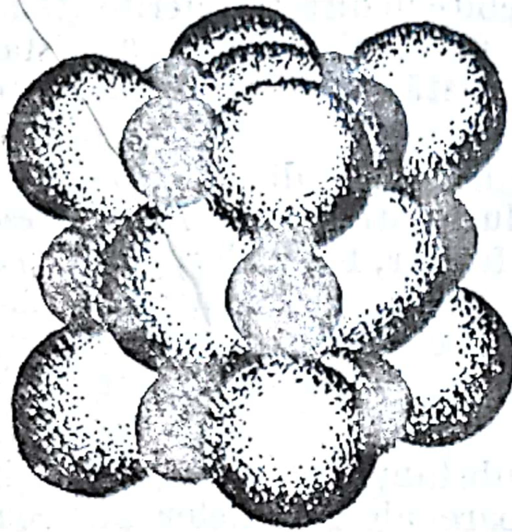
În general, punctele dintr-un cristal sînt diferite: într-un punct se află o particulă de un anumit fel (să zicem, un nucleu de Na), în altul, o particulă de alt fel (nucleu de Cl), într-un al treilea punct, în general nu există nici un nucleu, însă el este caracterizat de o anumită valoare, bine determinată, a potențialului electric, într-un al patrulea punct există o altă valoare a potențialului electric și așa mai departe (fig. 1.2).

Cu toate acestea, cristalul considerat ca întreg este omogen; orice parte a lui nu este cu nimic nici mai bună, nici mai rea decît o altă parte a sa*. Omogenitatea cristalului se definește prin existența așa-numitei *raze de omogenitate*, R: oricum s-ar lua într-un cristal o sferă de rază R, pe această sferă, pentru fiecare punct, există un alt punct la fel dispus (sau, după cum se obișnuiește să se spună, punctul *omolog* primului punct), adică într-o sferă de omogenitate există cel puțin două nuclee de Na, două nuclee de Cl etc. Așa cum rezultă din analiza röntgenografică, raza de omogenitate este de cîțiva angströmi. În același timp, cristalul este o structură discretă; fiecare punct din cristal poate fi înconjurat cu o sferă de discontinuitate care să aibă o rază atît de mică, încît în interiorul ei să nu mai existe nici un punct omolog cu ele. Pentru puncte diferite ale cristalului razele de discontinuitate sînt diferite, toate fiind însă, în orice caz, mai mici decît raza de omogenitate (fig. 1.3).

Vom remarca de la bun început că există o abordare duală a prezentării substanței cristaline: cristalele pot fi considerate atît medii discrete (adică discontinue), cît și medii continue (adică neîntrerupte). Faptul că structura internă este discretă înseamnă, firește, că proprietățile cristalului în locurile în care există parcule nu pot fi identice cu aceleași proprietăți în locurile în care acestea nu există, sau în locurile în care se află particule de diferite tipuri. Dealtfel, pentru descrierea multor proprietăți ale crista-

---

* Aici și în continuare nu avem în vedere defectele structurii cristalului, adică este vorba numai despre cristalul ideal. În orice cristal real există defecte ale structurii, legate de condițiile de creștere și de istoria cristalului, adică de tratamentele mecanice, termice etc., la care a fost supus.



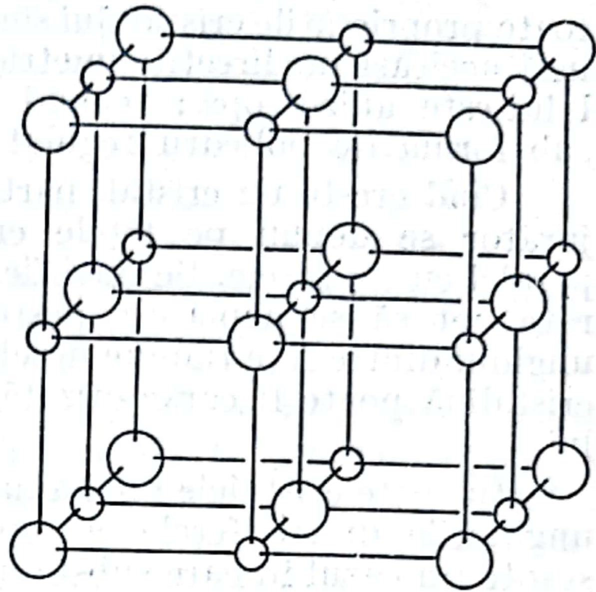


Fig. 1.2. Structura sării geme (clorură de sodiu) : model (*a*) și schemă (*b*)

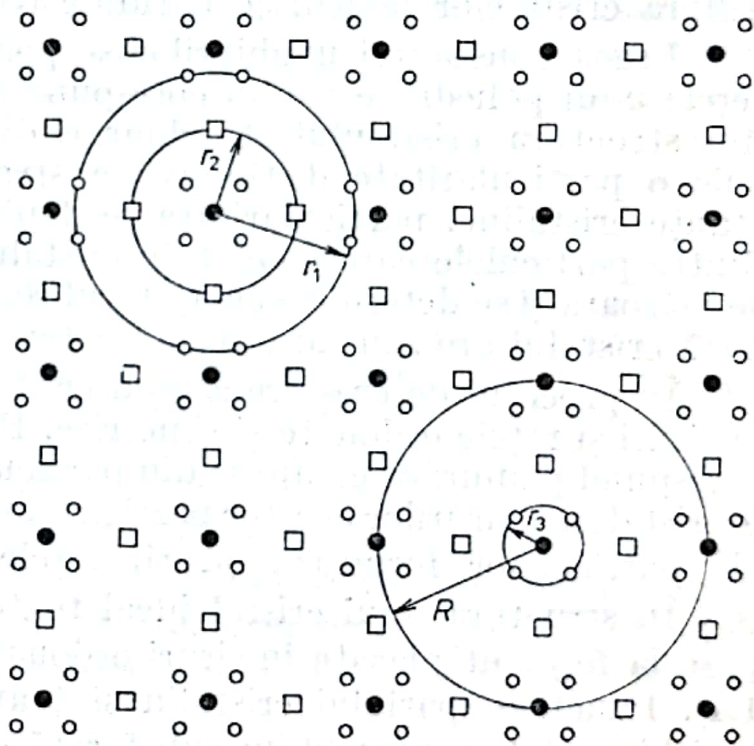


Fig. 1.3. Raza de omogenitate, R, a unui spaţiu cristalin şi razele de discontinuitate, r_1, r_2, r_3, ale diferitelor sale puncte.

lului este suficient să ne limităm la examinarea unor volume mult mai mari decît volumul propriu al particulei şi mult mai mici decît volumul cristalului în întregime. Tocmai în acest sens vom considera cristalul ca pe un mediu continuu şi omogen.

Anizotropia este însuşirea care constă în faptul că aceleaşi proprietăţi se manifestă deosebit pe direcţii diferite. Din cauza faptului că în structura cristalului distanţele dintre particule şi forţele dintre particule sînt diferite după direcţii diferite, aproape

toate proprietățile cristalului sînt deosebite în direcții diferite (fiind însă aceleași în direcții simetrice). Și viteza de creștere a cristalului este anizotropă: tocmai din această cauză cristalul crește sub formă de poliedru regulat simetric.

Cînd crește un cristal, particulele materiale din mediul înconjurător se depun pe fețele cristalului, astfel încît fețele cresc paralel cu ele însele. Se modifică aria fețelor, forma lor, fețe separate pot să se deplaseze peste cele vecine și să le acopere, dar unghiul dintre fețe rămîne neschimbat. De aceea, fiecare substanță cristalină poate fi caracterizată univoc prin unghiul dintre fețele lui.

În toate cristalele unei anumite substanțe, în aceleași condiții, unghiurile dintre fețele corespunzătoare ale cristalelor sînt constante (în cazul în care substanța există sub forma a cîtorva modificări polimorfe, totdeauna este vorba de o anumită modificare polimorfă). În aceasta constă *legea constanței unghiurilor cristalelor*, stabilită de Nikolai Stenon în anul 1669, pe baza observațiilor asupra cristalelor poliedrice naturale (Stenon, 1958).

Legea constanței unghiurilor se poate explica prin faptul că fețele unui poliedru cristalin corespund unor rețele plane atomice din structura cristalului. Unghiurile dintre rețelele plane constituie o particularitate distinctivă a structurii unei anumite substanțe cristaline, particularitate ce depinde de forțele de legătură dintre particulele care constituie cristalul. Astăzi, aceste unghiuri se măsoară și se determină cu ajutorul röntgenogramelor, indiferent dacă cristalul are sau nu o formă exterioară regulată.

În procesul de creștere a unui cristal particulele se aranjează în șiruri și rețele ordonate și simetrice. Fețele poliedrelor cristaline corespund planurilor compuse din particulele materiale, iar muchiile cristalului, șirurilor acestor particule materiale. Centrele de masă ale particulelor formează șiruri, rețele plane, rețele cristaline.

În structura unui cristal ideal toate punctele omoloage (dispuse la fel) sînt plasate în șiruri ordonate, simetrice, infinite (fig. 1.4). Punctele spațiului cristalin sînt anizotrope; de aceea, este mai bine să le reprezentăm sub formă de figuri mici, asimetrice, cu toate că, în majoritatea cazurilor, le vom reprezenta, de dragul simplificării, prin puncte sau mici sfere. Distanța cea mai mică dintre punctele omoloage, dintr-un șir infinit, se numește *translația cea mai scurtă*, sau *translația fundamentală, a*, sau *perioada translației, perioada de identitate a șirului, parametrul șirului*. În structura cristalului, aceasta este distanța dintre atomi.

Șirurile, rețelele plane și rețelele cristaline sînt considerate infinite. În majoritatea corpurilor cristaline distanța dintre atomi





Fig. 1.4. Şir simetric, infinit.

este de 3—5 Å; din această cauză, într-un volum de numai 1 mm³ se află aproximativ 10^{21} particule, ceea ce, practic, poate fi considerat, fără discuţie, un număr infinit.

Transformarea simetrică, cu ajutorul căreia un punct, fără a se roti, se repetă în spaţiu, adică deplasarea, transpunerea paralelă, se numeşte *transformare cu ajutorul translaţiei*, sau, simplu, translaţie (termenul de translaţie are două sensuri: 1) transformarea simetrică, ce reprezintă o deplasare paralelă, infinită, pe o anumită distanţă; 2) distanţa cea mai mică din şirul punctelor omoloage). Repetînd cu ajutorul translaţiei un punct oarecare, obţinem un şir periodic infinit de puncte omoloage, la distanţele $-a, \ldots, a, 2a, 3a, \ldots, na, \ldots$ Caracteristica acestui şir este translaţia $\boldsymbol{a}$. Punctele omoloage, legate între ei printr-o transformare simetrică cu ajutorul translaţiei $\boldsymbol{a}$, se numesc *nodurile* şirului. Notăm aici că un nod al şirului, ca şi, în continuare, un nod al reţelei plane sau al reţelei spaţiale, nu trebuie să coincidă neapărat cu o particulă materială.

Repetînd punctele unui şir simetric cu ajutorul unei alte translaţii, $\boldsymbol{a}_2$, neparalelă cu prima, obţinem un sistem de puncte omoloage sub formă de *reţea plană* (fig. 1.5). O reţea plană poate fi definită complet cu ajutorul a două translaţii, $\boldsymbol{a}_1$ şi $\boldsymbol{a}_2$, sau, de asemenea, cu ajutorul a trei noduri arbitrare, care nu se află pe aceeaşi dreaptă. Paralelogramele ale căror vîrfuri sînt noduri se numesc celule ale reţelei plane. Orice pereche de translaţii, care nu se află pe o aceeaşi dreaptă, va repeta punctele omoloage sub forma unei reţele plane; drept parametri fundamentali ai unei reţele plane au fost însă adoptate, prin convenţie, aşa-numitele *translaţii elementare* — cele mai scurte translaţii, care reflectă

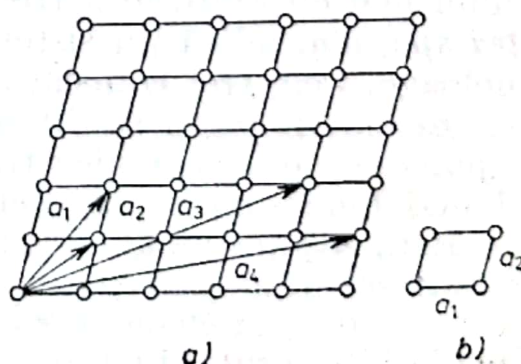


Fig. 1.5. Reţeaua plană simetrică infinită: *a*) posibilitatea alegerii diferite a translaţiilor elementare, $a_1, a_2, \ldots, a_5$; *b*) celulă primitivă, construită din cele mai mici translaţii şi simetria corespunzătoare reţelei.

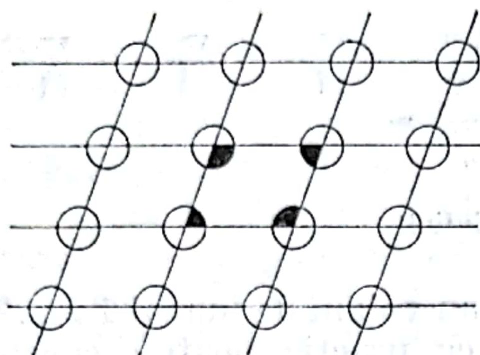


Fig. 1.6. Nodul din vîrful unei celule aparține concomitent celor patru celule. Partea ce revine unei singure celule este cea înnegrită.

simetria rețelei. O pereche de translații elementare, a_1 și a_2, definește complet schema de repetare a punctelor omoloage dintr-un plan.

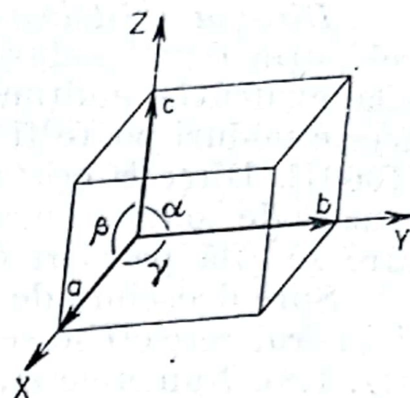
Celula ale cărei laturi sînt translații elementare se numește *celulă elementară* a rețelei plane. O celulă elementară este *primitivă*, dacă în interiorul ei nu există noduri. Suprafața celulei elementare este egală cu suprafața care revine fiecărui nod al rețelei, adică pentru o anumită rețea această mărime este constantă. De fapt, în fiecare vîrf al unei celule primitive există cîte un nod, dar acest vîrf este concomitent vîrful a patru celule vecine, ceea ce înseamnă că nodul aparține concomitent celor patru celule, adică fiecărei celule date, fiecărui vîrf al ei îi revin numai 1/4 dintr-un nod, iar în total, unei singure celule primitive îi revine $4 \cdot \frac{1}{4} = 1$ nod (fig. 1.6). Oricum am lua celula elementară primitivă, numărul nodurilor pe unitatea de suprafață, sau așa-numita *densitate reticulară* a rețelei, va rămîne același. Această mărime este constantă pentru o anumită rețea plană. În timpul creșterii cristalului se formează preferențial fețele cu o densitate reticulară mai mare.

Celulele elementare ale rețelei plane se lipesc una de alta, completînd perfect planul (fără spații goale), la infinit. Repetînd deplasările unei celule elementare paralel cu ea însăși, adică transformînd-o simetric cu ajutorul unei perechi de translații elementare, obținem întreaga rețea plană infinită.

Să adăugăm unei perechi de translații elementare o a treia translație, necoplanară cu primele două. Prin deplasarea la infinit a unui nod cu ajutorul a trei translații necoplanare vom obține o *rețea spațială*, adică un sistem simetric, tridimensional de puncte omoloage. Cele trei translații fundamentale, a_1, a_2, a_3, ale rețelei spațiale pot fi luate în diferite moduri, dar, ca și în cazul rețelei plane, de obicei se aleg translațiile cele mai mici, care reflectă cel mai bine simetria rețelei.

Paralelipipedul ale cărui laturi sînt cele trei translații elementare se numește *celulă elementară* sau *paralelipiped elementar*. Un paralelipiped elementar este considerat paralelipiped primitiv, dacă în interiorul lui nu există noduri.

Fig. 1.7. Paralelipipedul elementar (notațiile standard).



De regulă, lungimile translațiilor elementare, adică muchiile celulei elementare, se notează cu literele a, b, c, sau a_1, a_2, a_3, iar unghiurile dintre ele cu α, β, γ (fig. 1.7).

Grupul translațiilor celulei elementare cuprinde cele trei translații elementare, $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$, care corespund celor trei muchii ale celulei și care definesc complet rețeaua*.

Dacă sînt cunoscute cele trei translații fundamentale, $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$, atunci poziția oricărui nod al rețelei se determină cu ajutorul vectorului.

$$\boldsymbol{R} = m\boldsymbol{a}_1 + n\boldsymbol{a}_2 + p\boldsymbol{a}_3, \tag{1.1}$$

unde m, n, p sînt numere întregi, iar vectorii $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ definesc *baza vectorială* a rețelei.

Cele trei numere, m, n, p, închise între paranteze pătrate duble, $[[mnp]]$, poartă numele de *simbolul nodului*.

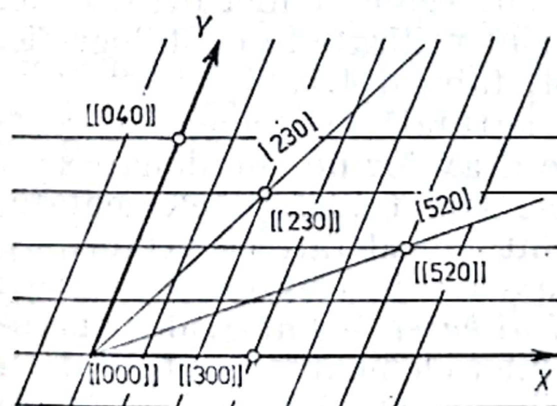


Fig. 1.8. Simboluri ale nodurilor și ale șirurilor.

* În cele ce urmează (§ 9) se va arăta că uneori este mai comod să se caracterizeze rețeaua nu prin intermediul celulei primitive, ci prin intermediul *celulei complexe*, care are noduri nu numai în vîrfuri, ci și în centrul celulei sau în centrele fețelor. În acest caz și grupul translațiilor se complică în mod corespunzător.

Direcţia cristalografică este direcţia dreptei care trece prin cel puţin două noduri ale reţelei. Pe o astfel de dreaptă se va afla, evident, o mulţime infinită de noduri ale reţelei. Unul dintre aceste noduri poate fi luat drept origine a axelor de coordonate, [[000]]. Direcţia cristalografică (şirul reţelei) va fi complet determinată de nodul cel mai apropiat de originea axelor de coordonate, care se află pe acea direcţie.

Spre deosebire de simbolul nodurilor, [[mnp]], simbolul direcţiei (şirul reţelei) se scrie între paranteze pătrate obişnuite, [mnp] (fig. 1.8). Numerele m, n, p se numesc în acest caz *indicii Miller* ai direcţiei cristalografice date şi ai tuturor direcţiilor paralele cu aceasta. Cei trei indici, scrişi între paranteze pătrate, se numesc *simbolul Miller pentru şir*. Indicii Miller se scriu unul după altul, fără virgulă, citindu-se separat, ca cifre (de exemplu, simbolul Miller [102] se citeşte : unu, zero, doi).

Direcţiile axelor de coordonate au următorii indici Miller : axa X — [100], axa Y — [010], axa Z — [001], indiferent de unghiurile dintre axele de coordonate.

Volumul unei celule elementare primitive este egal cu volumul unui singur nod : fiecare nod din vîrful unui paralelipiped elementar aparţine celor opt paralelipipede vecine, adică în total, unui paralelipiped îi revine $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$ nod. Paralelipipedele elementare sînt perfect lipite unul de altul. Întreaga reţea poate fi obţinută repetînd la infinit în spaţiu paralelipipedul elementar cu ajutorul celor trei translaţii fundamentale.

Mărimile a, b, c, α, β, γ, sau parametrii cristalului (*metrica cristalului*) sînt constante de material ale fiecărei substanţe cristaline. În cazul general, în cristale, $a \neq b \neq c$ şi $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$, adică translaţiile fundamentale nu sînt egale şi nici ortogonale. Toate sistemele de coordonate, care sînt utilizate în cristalografie, sînt enumerate în continuare, în § 4, tabelul 4.1.

Reţelele spaţiale constituie baza naturală a sistemelor de coordonate cristalografice. Drept origine a axelor de coordonate se ia unul dintre nodurile reţelei, iar cele trei translaţii elementare, care se intersectează în acest nod, sînt considerate ca vectori, $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$, avînd originea în originea axelor de coordonate. Aceşti vectori — denumiţi *vectori covarianţi ai bazei* — sînt evident necoplanari ; în caz contrar, volumul celulei elementare ar fi egal cu zero. Anume ei sînt cei ce determină sistemul cristalografic de coordonate : direcţiile lor coincid cu axele sistemului de coordonate, $X(\boldsymbol{a}_1)$, $Y(\boldsymbol{a}_2)$, $Z(\boldsymbol{a}_3)$, iar lungimile lor reprezintă unităţile de măsură naturale după axele respective. Vectorii $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ formează un triplet drept. În mod corespunzător, sistemul cristalografic de axe de coordonate, XYZ, va fi totdeauna un sistem rectiliniu,

drept, însă în general oblic, avînd unităţi de măsură diferite (incomensurabile) pentru cele trei axe.

Reţeaua spaţială este o construcţie geometrică cu ajutorul căreia se pun în evidenţă, în spaţiul cristalului, punctele omoloage. Cu alte cuvinte, reţeaua spaţială este o schemă a periodicităţii tridimensionale a distribuţiei particulelor din structura cristalului. Încă o dată atragem atenţia că un nod al reţelei nu trebuie să fie neapărat identificat cu o particulă materială. Reţeaua redă simetria structurii, independent de faptul că un nod coincide cu un atom de un tip sau de altul sau cu spaţiul dintre atomi. În acest din urmă caz se vor repeta simetric în spaţiu intervalele spaţiale şi atomii ce le înconjură.

Structura cristalului reprezintă o distribuţie concretă a particulelor materiale în spaţiu, reprezintă simetria, legile sau motivele acestei distribuţii. Reţeaua spaţială redă periodicitatea repetării în spaţiu a diferitelor particule materiale sau a grupurilor de astfel de particule, sau a „locurilor goale'' dintre aceste particule.

„Reţeaua reflectă dimensiunea şi forma unităţii de structură care se repetă, adică celula sa elementară, fără a determina însă care este distribuţia substanţei în însuşi interiorul celulei elementare. Într-o primă etapă acest fapt nici nu este important. Structura de rezistenţă (scheletul de oţel) al unui edificiu trebuie să existe înainte de a începe examinarea aranjării interioare sau a mobilării lui'' (Lonsdale, 1952).

§ 2. PROIECŢIILE CRISTALOGRAFICE

Metoda proiecţiilor cristalografice se aplică pentru reprezentarea simetriei formelor exterioare şi a structurii cristalelor, a anizotropiei şi a simetriei proprietăţilor lor, pentru descifrarea röntgenogramelor. Conform legii constanţei unghiurilor, atît forma unui poliedru cristalin, cît şi simetria şi anizotopia proprietăţilor lui pot fi caracterizate prin setul de unghiuri dintre feţele sale, sau, aşa cum se obişnuieşte în cristalografie, prin setul de unghiuri dintre normalele la feţe.

Să ne imaginăm o sferă care este circumscrisă cristalului. Din centru O al acesteia ducem normalele la feţele cristalului, prelungindu-le pînă ce intersectează sfera. Fiecare normală se va proiecta pe sferă ca un „punct polar'' (punctul a_1 din figura 2.1, a). Orice plan care trece prin centrul O intersectează suprafaţa sferei după arce de cerc. Dacă planurile sau direcţiile pe care le proiectăm nu trec prin punctul O, ele pot fi deplasate paralel cu ele însele, fără a afecta relaţiile unghiulare.

Poziția fiecărui punct pe sfera proiecțiilor este dată de două coordonate sferice: ρ — distanța polară, măsurată pentru orice azimut de la zero (polul nord, N) pînă la 180° (polul sud, S), și φ — longitudinea, măsurată pe ecuator, începînd de la meridianul considerat drept meridian zero (fig. 2.1, *b*). Proiecția sferică obți-

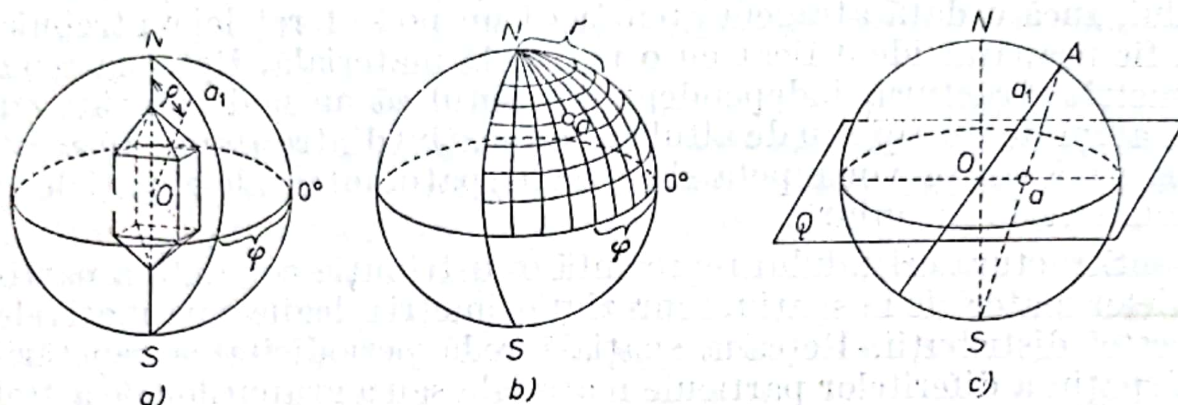


Fig. 2.1. Construirea proiecției sferice (*a*), măsurarea coordonatelor pe ea (*b*) și construirea proiecției stereografice (*c*).

nută se proiectează, la rîndul ei, în plan, sub formă de proiecție stereografică, proiecție gnomostereografică sau proiecție gnomonică (centrală).

Drept plan de proiecție pentru proiecția stereografică și pentru proiecția gnomostereografică se ia planul ecuatorial al sferei proiecțiilor, pe cînd planul proiecției gnomonice este planul tangent la polul nord al sferei proiecțiilor.

În proiecția stereografică direcțiile stereografice sînt reprezentate prin puncte, iar planurile prin arce de cercuri mari. În proiecția gnomostereografică lucrurile se petrec invers: planurile sînt reprezentate prin puncte, iar direcțiile prin arce de cercuri mari.

Proiecția stereografică se utilizează mai ales pentru reprezentarea elementelor de simetrie ale unui cristal. Ca plan al acestei proiecții servește planul ecuatorial, Q, al sferei proiecțiilor, pe care proiecția sferei este un cerc (fig. 2.1, *c*).

Pentru a proiecta o dreaptă, de pildă OA, se duce dreapta AS de la punctul polar A, de pe sfera proiecțiilor, pînă la polul sud, S, al sferei, Punctul a, de intersecție a liniei AS cu cercul proiecțiilor va fi proiecția stereografică a direcției OA. Proiecția stereografică a unei linii drepte este reprezentată printr-un punct în interiorul cercului proiecțiilor (fig. 2.2, *a*).

Direcțiile oblice, care au $0° < ρ < 90°$, se proiectează în interiorul cercului proiecțiilor, cu atît mai aproape de cerc, cu cît ρ este mai mare. Dacă $ρ > 90°$ (însă $ρ < 270°$), adică direcțiile ies prin emisfera inferioară a sferei proiecțiilor, atunci

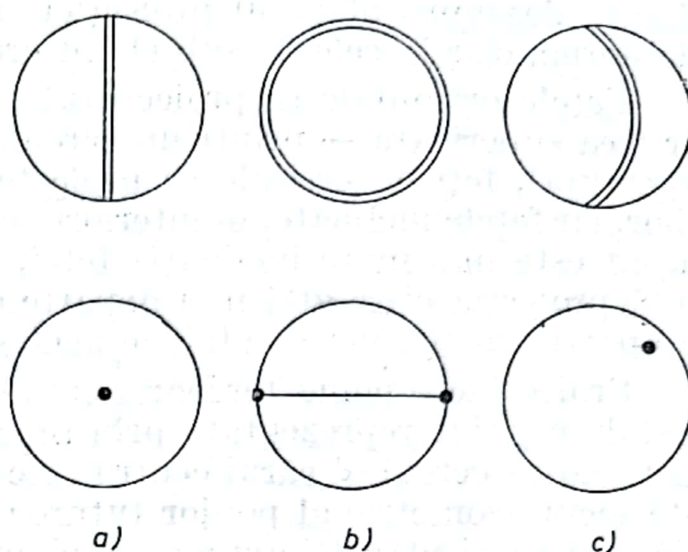


Fig. 2.2. În rîndul de sus — proiecţiile stereografice ale unor planuri (sau proiecţiile gnomostereografice ale unor direcţii); în rîndul de jos — proiecţiile stereografice ale unor direcţii (sau proiecţiile gnomostereografice ale unor planuri); toate se află faţă de planul proiecţiei: normale (*a*), paralele (*b*), înclinate (*c*).

sensul de proiectare este invers, notîndu-se în proiecţie nu cu cerculeţe, ci cu cruciuliţe.

Un plan care trece prin punctul *O* (ce intersectează sfera după un cerc, fig. 2.1) se va proiecta, în proiecţia stereografică, sub forma unui arc de cerc mare. Pentru a nu încărca desenul, de obicei se proiectează numai intersecţia planurilor sau liniilor din semisfera superioară.

Proiecţiile stereografice ale planurilor orizontale coincid cu circumferinţele cercului proiecţiilor (fig. 2.2, *b*), ale planurilor verticale, cu diametrele cercului proiecţiilor (fig. 2.2, *a*), iar ale planurilor înclinate, cu arcuri care se sprijină pe capetele diametrului (fig. 2.2, *c*). O linie verticală are drept proiecţie centrul cercului proiecţiilor, iar o linie orizontală două ieşiri pe circumferinţa ecuatorului.

Un cerc trasat pe sferă se reprezintă în proiecţia stereografică tot ca un cerc sau ca o linie dreaptă. În proiecţia stereografică relaţiile unghiulare nu sînt afectate, adică unghiul dintre polii feţelor de pe sferă (măsurat pe arcele cercurilor mari) este egal cu unghiul dintre proiecţiile stereografice ale aceloraşi arce.

Proiecţia gnomostereografică se utilizează în special pentru reprezentarea formelor cristalului, a feţelor şi a muchiilor lui. Ea este reprezentată tot printr-un cerc în planul ecuatorial al sferei proiecţiilor.

Pentru a obţine o proiecţie gnomostereografică a unui plan cristalografic (a unei feţe), se duce normala la acest plan (faţă) pînă la intersecţia cu sfera proiecţiilor, iar apoi dreapta care uneşte acest punct de intersecţie cu polul sud al sferei (pentru normalele care intersectează sfera în semisfera inferioară — cu polul nord al sferei). Proiecţia gnomostereografică a unui plan (faţă a cristalului) este un punct. Proiecţiile normalelor la feţele ce se află

plasate deasupra planului proiecţiei sînt notate cu cerculeţe, iar ale normalelor la cele de sub el, cu cruciuliţe.

Feţele orizontale se proiectează în centrul cercului proiecţiilor (cea superioară — printr-un cerculeţ, cea inferioară — printr-o cruciuliţă), feţele verticale se proiectează chiar pe cercul proiecţiilor, iar feţele înclinate, în interiorul cercului proiecţiilor (fig. 2.2). Cu cît este mai mare înclinaţia feţei, cu atît punctul care reprezintă proiecţia ei se află mai departe de centru. Proiecţiile feţelor ce aparţin unei zone se află pe acelaşi cerc mare al proiecţiilor.

Proiecţiile gnomostereografice ale direcţiilor (ale muchiilor cristalului) sînt reprezentate prin arce ale cercurilor mari. Cercul mare, adică cercul al cărui centru este centrul cercului proiecţiilor, este locul geometric al polilor tuturor feţelor ale căror normale se află în acelaşi plan (şi anume, în planul cercului mare).

Adesea, proiecţia stereografică şi proiecţia gnomostereografică se suprapun pe acelaşi desen.

Pentru rezolvarea problemelor cu ajutorul proiecţiilor stereografice sau al proiecţiilor gnomostereografice se utilizează reţele gradate. Cea mai des folosită este reţeaua lui Wulf — proiecţia stereografică a întregului sistem de meridiane şi de paralele de pe suprafaţa sferei, pe planul unuia dintre meridiane.

Reţeaua lui Wulf se desenează de obicei pe un cerc cu diametrul de 20 cm, iar liniile paralelelor şi ale meridianelor, ale căror proiecţii sînt arce de cerc, sînt trasate din două în două grade. Distanţa dintre ele poate fi împărţită „din ochi" în încă patru părţi, astfel încît se poate lucra cu o precizie de pînă la 0,5° (fig. 2.3).

Reţeaua polară a lui A. K. Boldîrev (fig. 2.4) reprezintă proiecţia stereografică a sistemului de paralele şi de meridiane de pe suprafaţa sferei pe planul ecuatorial. Punctul din care se priveşte se află în polul sud. Liniile sînt trasate din două în două grade sau din cinci în cinci grade. Meridianele sînt reprezentate prin drepte care pleacă radial din centrul proiecţiei; aceste drepte reprezintă de fapt arce ale căror raze sînt infinit de mari. Meridianul iniţial, meridianul zero, se notează cu 0, iar mai departe, meridianele se indexează cu cifre, din zece în zece grade. Paralelele sînt reprezentate prin cercuri concentrice. Proiecţia ecuatorului coincide cu circumferinţa proiecţiei, iar proiecţia polului („paralela zero"), cu punctul din centrul proiecţiei. Longitudinile φ se măsoară de la meridianul zero, în sensul acelor de ceas, iar distanţele polare se măsoară pe meridian, de la centrul proiecţiei.

Reţeaua lui E. S. Fiodorov reprezintă o combinaţie între două reţele Wulf, rotite una faţă de alta cu 90°, şi o reţea polară Boldîrev. Diviziunile sînt din cinci în cinci grade.

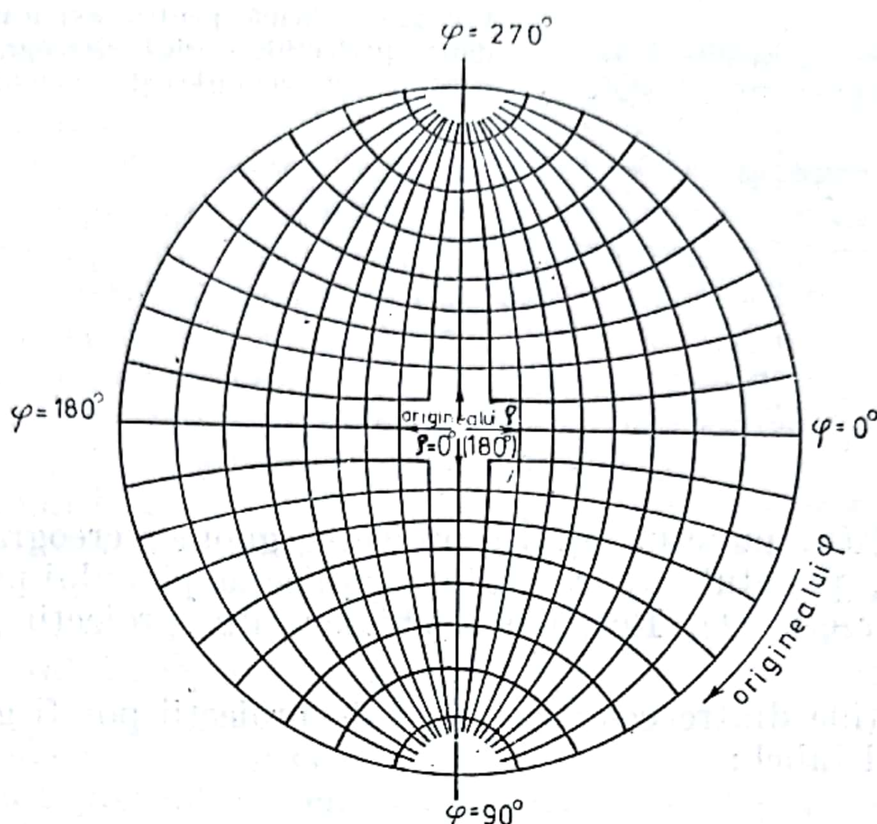


Fig. 2.3. Schema unei rețele Wulf și măsurarea coordonatelor cu ajutorul ei.

În § 24 va fi tratată metodica folosirii proiecțiilor stereografice și a rețelelor lui Wulf, Fiodorov și Boldîrev, pentru reprezentarea simetriei și a anizotropiei proprietăților cristalelor.

Relația dintre proiecția sferică, proiecția stereografică, proiecția gnomostereografică și proiecția gnomonică este dată în figura 2.5 Proiecția direcției OA (v. fig. 2.1) dă, în proiecție sferică de rază r, un punct a, determinat prin coordonatele φ, ρ, în proiecție gnomonică (planul MM), punctul a_2, în proiecție stereografică

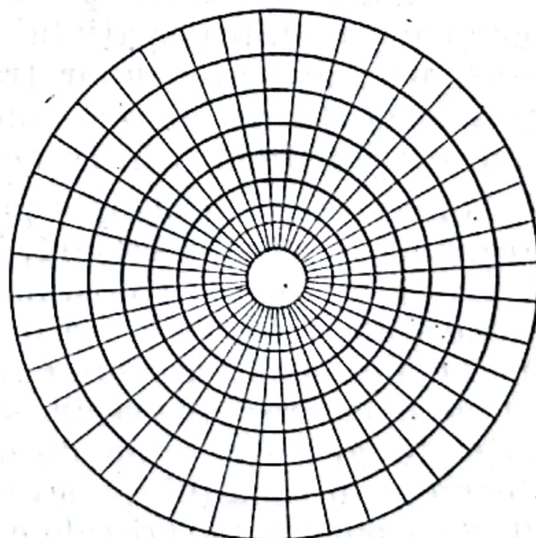


Fig. 2.4. Schema unei rețele Boldirev.

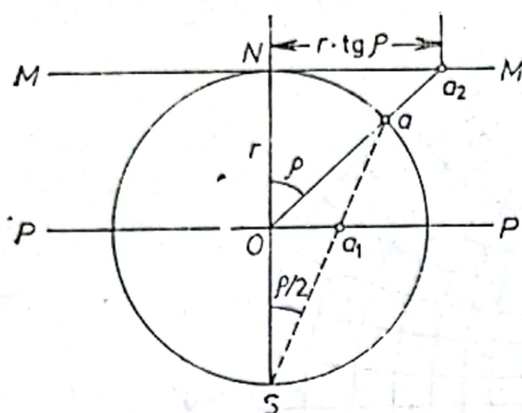


Fig. 2.5. Schemă pentru explicarea relațiilor dintre proiecțiile sferică, stereografică, gnomostereografică și gnomonică.

(planul PP), punctul a_1. În proiecția gnomostereografică (planul PP), punctul a_1, reprezintă proiecția planului perpendicular pe direcția Oa. Relațiile unghiulare din proiecții se văd în figură.

Relațiile dintre cele trei feluri de proiecții pot fi grupate în următorul tabel :

Proiecția	Reprezentarea	
	Unui plan	Unei drepte
Stereografică	Arc de cerc mare	Punct
Gnomostereografică	Punct	Arc de cerc mare
Gnomonică	Punct	Dreaptă

§ 3. ELEMENTE DE SIMETRIE SIMPLE, FINITE, ALE CRISTALELOR

Se numește *simetrie geometrică* a spațiului cristalin (sau a unei figuri) proprietatea spațiului (sau a figurii) de a coincide cu el însuși prin aplicarea unor transformări simetrice. *Operațiile* sau *transformările de simetrie* sînt reflexia, rotația, translația, care aduc spațiul (figura) în coincidență cu el însuși.

Simetria și anizotropia proprietăților fizice ale cristalelor apar pregnant în forma exterioară, de poliedru, a cristalelor. Menționăm că forma de poliedru cristalin real este totdeauna rezultatul nu numai al anizotropiei vitezei de creștere, ci și al condițiilor exterioare în care a crescut cristalul, cum ar fi : gradientul de temperatură, contactul cu cristalele vecine sau cu pereții cristalizorului, acțiunea forței de greutate, influența neomogenităților mediului ș.a. Făcînd abstracție de condițiile reale de creștere, vom examina, deocamdată, simetria poliedrelor cristaline ideale.

Se numește *figură simetrică* sau *poliedru simetric,* acea figură (poliedru) care poate fi adusă să coincidă cu ea însăși prin transformări simetrice.

Elementele de simetrie sînt conceptele ajutătoare (puncte, linii, drepte, planuri) cu ajutorul cărora se revelează simetria figurii (sau spațiului). În orice transformare simetrică toate distanțele dintre punctele figurii rămîn neschimbate, adică nu se produc întinderi, contracții, încovoieri etc.

Transformările simetrice pot fi clasificate în două tipuri : 1) *finite* sau *punctuale,* în care un singur punct al figurii rămîne pe loc și 2) *infinite* sau *spațiale,* în care nu rămîne pe loc nici un punct al figurii. Transformările simetrice finite corespund poliedrelor cristaline ideale, iar cele infinite, simetriei structurilor.

Pentru descrierea elementelor de simetrie vom utiliza simbolurile internaționale, introduse de Hermann și Mauguin și adoptate de Congresul Internațional al Cristalografilor. În literatura de fizică și în cea de cristalografie se utilizează adesea alte sisteme de notare, explicate în cele ce urmează.

Pentru reprezentarea elementelor de simetrie și a transformărilor simetrice vom utiliza proiecția stereografică. Semnele convenționale internaționale pentru reprezentarea elementelor de simetrie într-un plan de proiecție sînt date în tabelul 3.1.

Operații de simetrie finite, simple. Operațiile simpe de simetrie sînt reflexia (oglindirea) și rotația. Ele sînt definite de următoarele elemente de simetrie.

	Simbolul internațional
Planul de simetrie	m
Axa de simetrie	$n(n = 2, 3, 4, 6)$
Centrul de simetrie	$\bar{1}$

(Aici n, adică 1, 2, 3, 4, 6, reprezintă ordinul axei ; vezi în continuare.)

Planul de simetrie (m) este planul care împarte figura în două părți egale prin oglindire, părți care se află una față de alta ca obiectul față de imaginea lui în oglindă, ca mîna dreaptă față de mîna stîngă.

Într-un triunghi echilateral, de exemplu, există trei planuri de simetrie, normale la planul triunghiului ; proiecțiile lor pe planul triunghiului sînt date în figura 3.1. Dacă este vorba despre simetria unui triunghi obișnuit, adică despre o figură geometrică formată din trei drepte matematice, atunci el nu mai are planuri de simetrie. Dacă însă triunghiul considerat este o figură materială, atunci simetria poate fi mai complicată. Dacă triunghiul este decupat din hîrtie albă, de pildă, astfel încît atît fața cît și rever-

Tabelul 3.1

Elementele de simetrie ale figurilor finite și notațiile lor standard

Denumirea			Notația internațională	Reprezentarea în raport cu planul desenului	
				Perpendiculară	Paralelă
Plan de simetrie			m		
Centru de simetrie			$\bar{1}$		
Axe de simetrie	de rotație	binare (diagonale, digire)	2		
		ternare (trigonale, trigire)	3		
		cuaternare (tetragonale, tetragire)	4		
		senare (hexagonale, hexagire)	6		
	de inversie	cuaternare	$\bar{4}$		
		senare	$\bar{6}$		
		ternare	$\bar{3}$		

sul sînt identice, atunci încă mai există un plan de simetrie care coincide cu planul triunghiului. Dacă însă triunghiul are „fața" și „reversul" diferite, de exemplu pe o față este alb, iar pe cealaltă negru, atunci nu mai există un asemenea plan de simetrie.

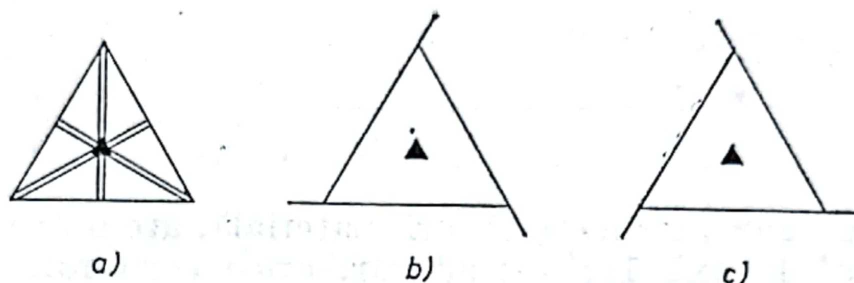


Fig. 3.1. Simetria triunghiului : axa 3 care este neutră și cele trei planuri de simetrie (*a*), axa 3 este dreaptă, fără planuri (*b*), axa 3 este stîngă, fără planuri (*c*).

Într-un cub (fig. 3.2) se pot număra nouă planuri de simetrie, trei dintre ele fiind perpendiculare la fețele cubului, iar șase după planurile diagonale. În partea dreaptă a figurii este arătată proiecția stereografică a planurilor de simetrie ale cubului.

Se numește *axă de simetrie* (n) linia dreaptă în jurul căreia, prin rotație, se obține aceeași figură. Unghiul de rotație elementar, adică unghiul de rotație cel mai mic, care aduce figura în coincidență cu ea însăși, este un submultiplu al lui 2π; în caz contrar figura nu se va suprapune cu ea însăși printr-o rotație completă. Numărul n este așa-numitul *ordin al axei*; el indică de cîte ori se va suprapune figura cu ea însăși, la o rotație completă în jurul axei.

În figura 3.1 sînt reprezentate trei triunghiuri echilaterale. Fiecare are o axă de simetrie de ordinul trei (axă 3). Primul triunghi (*a*) are, în afară de aceasta, trei planuri de simetrie (perpendiculare la planul desenului), pe cînd triunghiul al doilea și triunghiul al treilea (*b* și *c*) nu au astfel de planuri de simetrie; ele au numai cîte o axă de simetrie dreaptă sau stîngă. Considerînd acum aceste triunghiuri ca figuri materiale, le putem defini ca triunghiuri simetrice drepte sau stîngi.

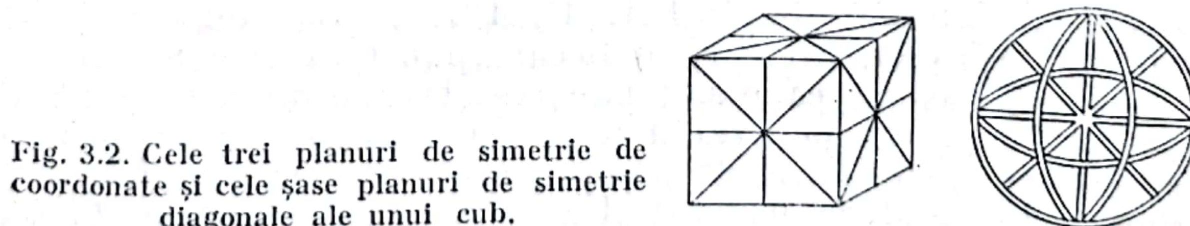


Fig. 3.2. Cele trei planuri de simetrie de coordonate și cele șase planuri de simetrie diagonale ale unui cub.

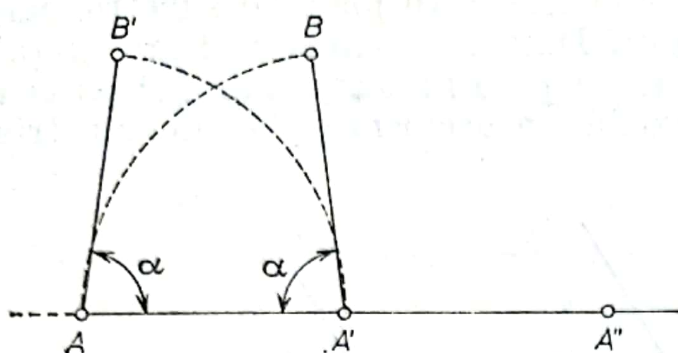


Fig. 3.3. Schemă pentru demonstrarea imposibilității existenței axei de simetrie de ordinul cinci, într-un mediu cristalin.

Orice figură, geometrică ori materială, are o axă de simetrie de ordinul 1 (axă 1); într-adevăr, orice corp rotit cu 360° în jurul oricărei direcţii se suprapune complet cu el însuşi.

Figura geometrică cea mai simetrică este sfera: fiecare din mulţimea infinită a diametrelor sale este o axă de ordin infinit (∞); de asemenea, prin fiecare diametru trece o mulţime infinită de planuri de simetrie.

Conul are o axă de simetrie de ordin infinit, care coincide cu axa sa. Conul se confundă cu sine dacă este rotit cu orice unghi în jurul acestei axe. Totodată, orice plan care trece prin această axă este un plan de simetrie al conului; prin urmare, conul are o mulţime infinită de planuri de simetrie.

Să trecem din nou de la figura geometrică la o figură materială. Fie, de exemplu, un con haşurat sau lipit cu pluş, considerat astfel încît toţi perişorii să fie neteziţi într-o singură direcţie, sau — mai simplu — fie un con care se roteşte cu regularitate în jurul axei sale (exemplul este luat din cartea lui A. V. Şubnikov, 1951). Conul se va suprapune, ca şi mai înainte, cu el însuşi prin rotire în jurul axei sale cu orice unghi, adică el are şi acum o axă de simetrie, însă îşi pierde toate planurile sale de simetrie: rotirea uniformă a modificat simetria figurii materiale.

În corpurile din natură — flori, fructe, scoici etc. — în figurile geometrice, în operele artistice se găsesc axe de simetrie de orice ordin, de la 1 la ∞. În formele geometrice ale cristalelor sînt posibile axele de simetrie 1, 2, 3, 4, 6. În cristale nu sînt posibile axe de ordinul cinci şi de ordine mai mari ca şase.

Să ne imaginăm că o axă de simetrie de ordinul n, de unghi de rotaţie $\alpha = 2\pi/n$, iese normal din planul desenului în punctul A, care este un nod din şirul A, A', A'',..., aşa cum se vede în figura 3.3. Atunci, evident, în fiecare punct omolog al acestui şir va ieşi, de asemenea, o astfel de axă. Dacă o rotire cu unghiul α în jurul axei din punctul A deplasează punctul A' în poziţia B, atunci o rotire de acelaşi unghi, în jurul axei care iese din punctul A' va duce punctul A în poziţia B'. Punctele B, B',

...va trebui să formeze un șir de puncte omoloage, șir paralel cu șirul AA', astfel încît distanța BB' va fi egală cu

$$BB' = Nt,$$

unde t este translația AA', iar N un număr întreg. Deoarece

$$BB' = t - 2t \cos \alpha,$$

rezultă că

$$t - 2t \cos \alpha = Nt,$$

de unde

$$\cos \alpha = \frac{1 - N}{2}.$$

Din condiția

$$-1 \leqslant \cos \alpha \leqslant +1,$$

se obțin toate valorile posibile ale unghiurilor α:

N	-1	0	1	2	3
$\cos \alpha$	1	1/2	0	$-1/2$	-1
α	0°	60°	90°	120°	180°
Ordinul axei de simetrie	1	6	4	3	2

Prin urmare, condiției de periodicitate și de continuitate a șirului de puncte omoloage îi vor corespunde numai axele de simetrie 2, 3, 4 și 6. Analog se demonstrează că atît în rețeaua plană cît și în rețeaua spațială nu pot exista decît axe de simetrie tot numai de aceste ordine. În cristale nu pot exista axe de simetrie de ordinul cinci, șapte sau de ordine mai mari.

Este interesant de remarcat că axa de ordinul cinci, imposibilă în cristale, s-a pus în evidență în cercetările din ultimii ani ale structurilor biologice (ale ,,cristalelor de natură vie''). ,,Se poate crede — scrie acad. N. V. Belov — că axa de ordinul cinci este pentru organismele vii un original instrument al luptei pentru existență, de garanție împotriva împietririi, împotriva cristalizării, al cărei prim pas ar fi « prinderea » rețelei'' (Belov, 1962).

În figura 3.4 se arată că poligoanele cu axe de simetrie 2, 3, 4 și 6 acoperă planul simetric și continuu, așa cum ar fi, de exemplu, în cazul unui fagure (axă 6). Este imposibil să se completeze simetric și continuu un plan cu pentagoane, septagoane ori

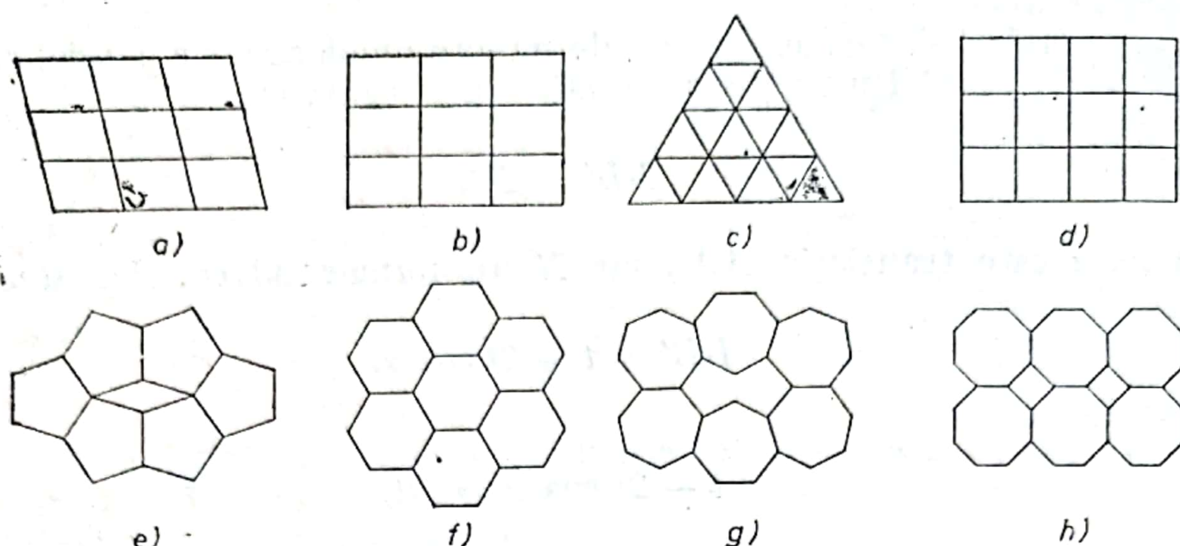


Fig. 3.4. Completarea planului cu poligoane avînd axe de simetrie 1 (*a*), 2(*b*), 3(*c*), 4(*d*), 5(*e*), 6(*f*), 7(*g*), 8(*h*).

octogoane, fără să rămînă „găuri”, care strică simetria. Octogoanele pot fi observate adesea în configurația parchetelor, de pildă; la prima vedere ni se poate părea că într-o asemenea configurație există o axă de simetrie de ordinul opt. În realitate, aici întîlnim un caz aparte, în care octogonul regulat nu are axă de simetrie 8, ci numai axă 4: fiecare octogon este înconjurat de patru pătrate mai mici, care umplu golurile. Fiecare octogon în parte are, firește, axă de simetrie 8, dar pătrățelele de pe laturile lui i-au scăzut ordinul simetriei axei lui la 4.

Să așezăm același octogon în centrul unui cerc (fig. 3.5, *a*). Dacă este examinat separat, cercul are o axă de simetrie de ordin infinit (axă ∞) și un număr infinit de planuri de simetrie, care trec prin ea. Axa de simetrie de ordin infinit include în ea orice

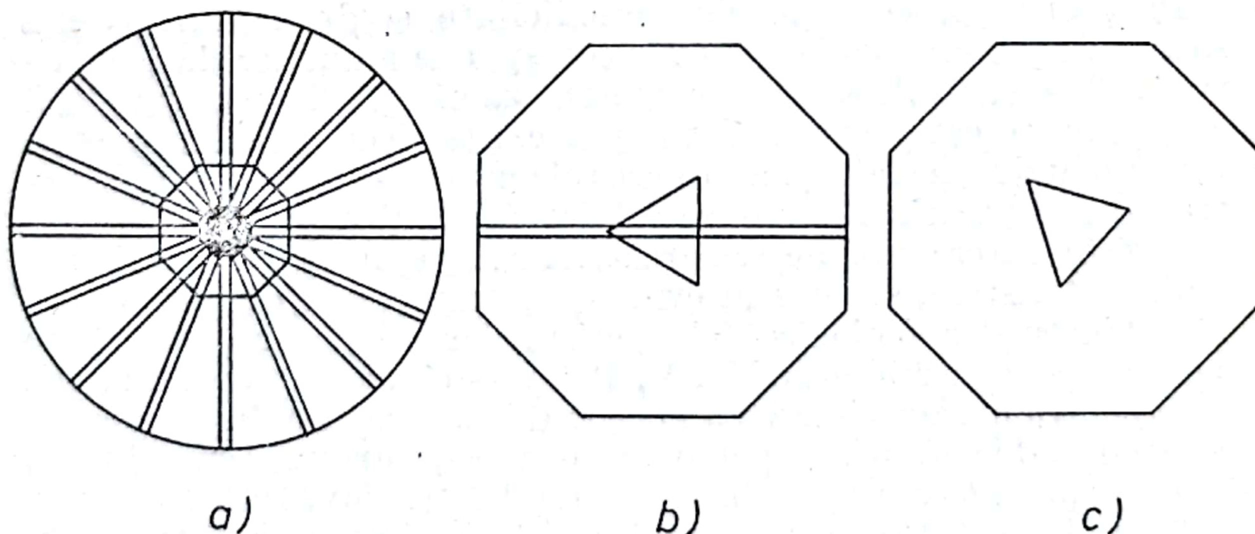


Fig. 3.5. Ilustrarea principiului Curie: *a*) a dispărut axa de simetrie ∞ a cercului, rămînînd axa 8 și cele opt planuri de simetrie; *b*) a dispărut axa ∞ și axa 8, a rămas numai planul comun de simetrie; *c*) nu există elemente de simetrie comune.

rotații, adică axe de simetrie de orice ordin. Însă octogonul înscris în cerc „interzice" toate rotirile, în afară de cele care se fac cu un unghi de $2\pi/8$ sau multipli ai acestuia : mai rămîn comune, pentru cerc și octogon, axa 8 și opt planuri de simetrie.

Un alt exemplu : suprapunînd peste octogon un triunghi echilateral (fig. 3.5, *b*), vom vedea că mai „supraviețuiește" numai un singur plan de simetrie, comun ambelor figuri, dar și acesta numai în cazul în care triunghiul este așezat simetric.

Acestea sînt exemple geometrice particulare ale *principiului* general *de simetrie* sau *principiul lui Curie*, conform căruia în cazurile în care se suprapun două fenomene sau un fenomen și mediul său ambiant se păstrează numai acele elemente de simetrie care le sînt comune (vezi § 25).

Studiind simetria unei figuri trebuie să facem o distincție clară dacă este vorba numai despre simetria figurii însăși, fără a lua în considerație și ceea ce o înconjură, sau despre simetria figurii împreună cu tot ce o înconjură. Formele poliedrelor cristaline reale poartă totdeauna amprentele condițiilor de creștere și de simetrie ale mediului în care a fost format cristalul. În această carte vom examina însă simetria poliedrului cristalin ideal, fără a lua în considerație mediul înconjurător.

Într-o figură geometrică pot exista cîteva axe de simetrie de diferite ordine precum și planuri de simetrie și alte elemente de simetrie. De exemplu, cubul are trei axe 4 (ele trec prin centrele fețelor ca axele de coordonate ale unui sistem triortogonal), patru axe 3 (prin perechile de vîrfuri opuse) și șase axe 2 (prin mijloacele muchiilor opuse) ; aceste axe de simetrie și proiecțiile lor stereografice sînt reprezentate în figura 3.6.

Să examinăm două puncte dintr-o proiecție (fig. 3.7). Punctul *B* poate fi obținut din punctul *A* printr-o transformare sime-

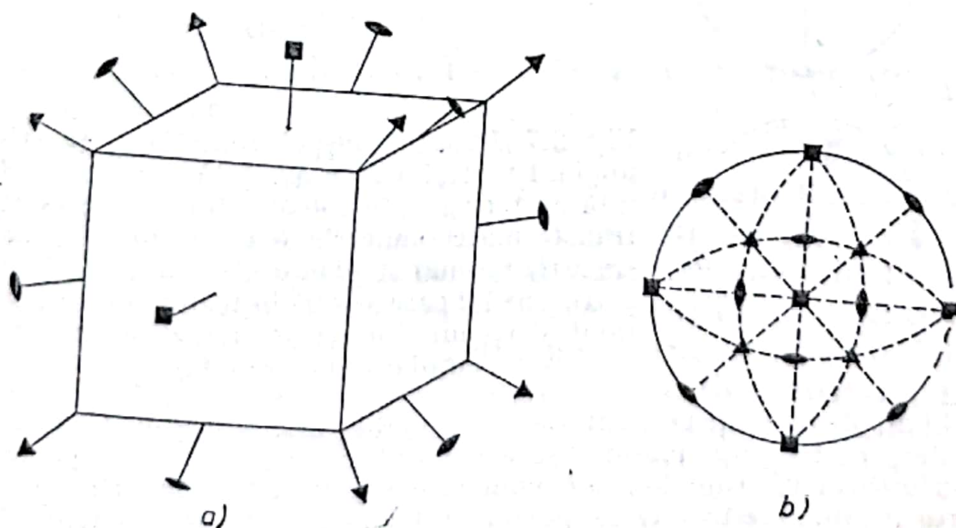


Fig. 3.6. Axele de simetrie ale cubului (*a*) și proiecțiile lor stereografice (*b*).

trică, oglindind punctul A în planul de simetrie m (fig. 3.7, *a*), sau rotind punctul A în jurul axei de simetrie 2, care se află în planul de proiecție (fig. 3.7, *b*). Cum putem afla care este transformarea care s-a produs de fapt? Deosebirea devine evidentă dacă se rotește simetric sau se oglindește nu un punct, ci o figură materială: un triunghi care are fața albă și reversul negru. Axa 2 (fig. 3.7, *b*) rotește triunghiul „de pe față pe dos", pe cînd planul de simetrie (fig. 3.7, *a*) îl reflectă, fără a-l roti. Dacă triunghiul se oglindește într-un plan de simetrie m, care coincide cu planul desenului, atunci partea neagră a lui se confundă cu cea albă; vom reprezenta acest fapt printr-un punct negru pe fond alb (fig. 3.7, *c*)*.

Se numește *centru de simetrie* ($\bar{1}$) (*centru de inversie, centrul egalității inverse*) un anumit punct din interiorul unei figuri, care se caracterizează prin aceea că orice dreaptă care trece prin el întîlnește punctele analoage (corespondente) ale figurii de ambele părți ale lui și la distanțe egale. Astfel, transformarea simetrică în centrul de simetrie este o reflexie față de un punct, care întoarce o figură „de pe față pe dos" (fig. 3.8, *a*).

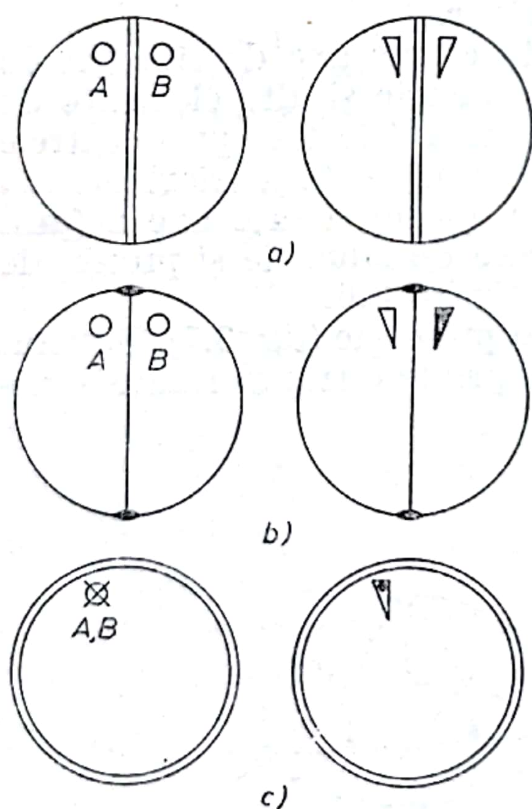
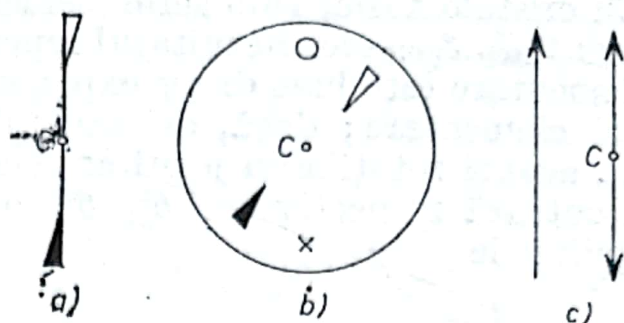


Fig. 3.7. Punctul (în coloana stîngă) și triunghiul material care are față anterioară și față posterioară (în coloana din dreapta) sînt transformate simetric de către un plan de simetrie normal la planul desenului (*a*), de către o axă 2 care se află în planul desenului (*b*), de către un plan de simetrie care coincide cu planul desenului (*c*).

* „Un triunghi alb de pe semisfera anterioară, oglindindu-se în planul de simetrie, trece pe semisfera posterioară, plasîndu-se exact sub el, astfel încît nu poate fi văzut. Făcînd un orificiu în triunghiul alb vom vedea prin el triunghiul al doilea, care ne va părea negru. Acesta este sensul punctului negru, desenat în centrul triunghiului". (A. V. Șubnikov, 1951).

Fig. 3.8. Transformare simetrică realizată de către un centru de simetrie (*a*), proiecţia stereografică a unor feţe simetrice faţă de un centru de simetrie (*b*), săgeată polară (fără centru de simetrie) şi nepolară (cu centru de simetrie) (*c*).



În figura 3.8, *b* sînt reprezentate proiecţiile stereografice în cazul a două feţe ale cristalului, simetrice faţă de centrul de simetrie, una dintre ele aflîndu-se pe semisfera superioară a sferei proiecţiilor (cerculeţ), iar cealaltă pe semisfera inferioară (cruciuliţă). Aceeaşi transformare este ilustrată folosind triunghiul alb-negru ; reflexia în centrul de simetrie roteşte triunghiul „de pe faţă pe dos".

În cristalele în care există centru de simetrie nu pot exista drepte polare. Se numeşte dreaptă *polară* dreapta care are proprietăţi diferite în sensuri diferite (fig. 3.8, *c*). Să considerăm, de pildă, axa de simetrie de ordinul patru dintr-o prismă tetraedrică, sau dintr-o piramidă tetragonală. Cele două baze ale prismei sînt la fel ; prin reflexia în centrul de simetrie, sau în planul transversal de simetrie, o extremitate a axei 4 va coincide cu cealaltă şi viceversa ; nu există nici o diferenţă între sensurile unei axe 4 — axa *nu este polară*. În piramidă există, de asemenea, o axă patru, însă prin nici un fel de operaţii de simetrie, proprii piramidei însăşi, nu poate fi adus vîrful piramidei să coincidă cu baza sa, adică o extremitate a axei cu cealaltă — axa de simetrie 4 a unei piramide este polară. Aceleaşi axe 4 ale unui cub nu mai sînt însă polare, dat fiind că în cub există un centru de simetrie. Axa de simetrie a conului, de pildă, este polară, pe cînd axa de simetrie a cilindrului nu mai este polară. Pentru amănunte se poate consulta anexa C.

Setul *m*, 2, 3, 4, 6, $\bar{1}$ epuizează elementele de simetrie simple, posibile într-un cristal.

Orice element de simetrie al unei figuri dă naştere unui set de operaţii de simetrie : axa 3 — rotaţiile figurii cu 120° şi 240° ; axa 4 — cu 90°, 180° şi 270° ; axa 6 — cu 60°, 120°, 180°, 240° şi 300°. Toate rotaţiile generate de o axă de simetrie pot fi considerate rezultat al repetării unei singure rotaţii elementare ; pentru axa 2 aceasta este rotaţia cu 180°, pentru axa 4 — cu 120°, pentru axa 6 — cu 60°. Spre deosebire de axele de simetrie, notate cu cifre drepte, vom nota rotaţiile elementare cu simbolul cursiv al axei, la care se adaugă un indice, care arată cu ce axă de coordonate coincide respectiva axă de simetrie : 2_x , 3_z etc. Utilizînd indicii

din cristalografie, vom scrie elementele de simetrie în felul următor: $2_{[100]}$, $3_{[001]}$ etc. Rezultatul repetării de cîteva ori a unei rotații elementare este luat drept exponentul corespunzător puterii rotației elementare; dacă, de exemplu, rotația cu 60° este notată 6_z, atunci rotațiile în jurul aceleiași axe cu 120°, 180°, 240°, 300° se notează respectiv cu 6_z^2, 6_z^3, 6_z^4, 6_z^5. Evident sînt adevărate egalitățile

$$6_z^2 = 3_z\,;\; 6_z^3 = 2_z\,;\; 4_z^2 = 2_z.$$

Operația de reflexie într-un plan de simetrie m se notează cu simbolul planului însoțit de un indice, care arată axa de coordonate ce este perpendiculară la acest plan: m_x sau $m_{(100)}$. *Operația de inversie*, adică reflexia în centrul de simetrie $\bar{1}$, se notează cu simbolul $\bar{1}$.

În afară de aceasta, dintre operațiile de simetrie face parte și *identitatea* sau *operația unitate*; aceasta „este operația de transformare a figurii în ea însăși, cînd o lăsăm pe loc" (A. V. Șubnikov, 1951; termenul de „identitate" a fost introdus tot de Șubnikov). Identitatea se notează cu simbolul 1.

Dacă figura are cîteva elemente de simetrie, atunci ansamblul operațiilor de simetrie, generate concomitent de ele, se complică în mod corespunzător.

Să examinăm un exemplu. Fie ca figura să aibă o axă 3 și, perpendicular pe ea, axa 2 (aceasta este simetria cristalelor de cuarț, figura 3.9). Axa 3 generează rotațiile 3 și 3^2, iar axa 2 rotația 2_x. Deoarece fiecare operație de simetrie transformă figura (poliedrul ideal de cuarț) în ea însăși, rezultatul aplicării succesive a cîtorva operații de simetrie — care se numește *produsul* acestor operații — transformă, de asemenea, figura în ea însăși; deci și produsul este una dintre operațiile de simetrie. Să examinăm rezultatul efectuării succesive a două operații de simetrie: mai întîi 3_z, apoi 2_x; în proiecție (fig. 3.10, *a*), același rezultat se obține prin aplicarea unei singure operații, și anume 2_u. În figura 3.10, *a*, triunghiul *A*, printr-o rotație cu 120° în jurul axei 3_z, ajunge în poziția *B*, iar după aceasta, prin rotația cu 180° în jurul axei 2_x, în poziția *C*. Dar trecerea *A* în *C* se poate face și dintr-odată, prin rotirea în jurul axei 2_u. Acest rezultat se scrie astfel: $2_x 3_z = 2_u$. În dreapta „produsului" se scrie acea operație care s-a efectuat prima. Ordinea de scriere este esențială: figura 3.10, *b* ilustrează cum modificarea ordinii operațiilor a dus la un alt rezultat: $3_z 2_x = 2_y$. Într-adevăr, în figura 3.10, *b* triunghiul *A*, în urma rotației cu 180° în jurul axei 2_x ajunge în poziția *D*, iar apoi printr-o rotație cu 120° în jurul axei 3_z, în

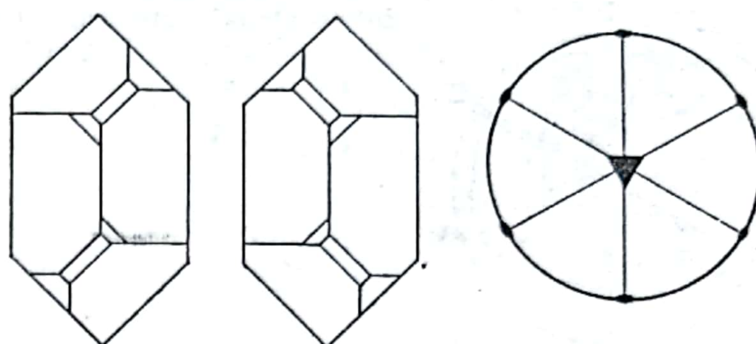


Fig. 3.9. Cristalul de cuarț sting și cristalul de cuarț drept și proiecția stereografică a elementelor lui de simetrie.

poziția E; se poate transpune A în E și direct, printr-o rotație cu 180° în jurul axei 2_y.

Rezultatele tuturor perechilor posibile de operații de simetrie aplicate succesiv unui cristal sînt trecute în tabelul înmulțirii (după cum se va arăta în § 5, acesta este tabelul înmulțirii grupului 32).

Factorii		Din dreapta					
		1	3_z	3_z^2	2_x	2_y	2_u
Din stînga	1	1	3_z	3_z^2	2_x	2_y	2_u
	3_z	3_z	3_z^2	1	2_y	2_u	2_x
	3_z^2	3_z^2	1	3_z	2_u	2_x	2_y
	2_x	2_x	2_u	2_y	1	3_z^2	3_z
	2_y	2_y	2_x	2_u	3_z	1	3_z^2
	2_u	2_u	2_y	2_x	3_z^2	3_z	1

După cum se vede din tabel, datorită existenței în cristalul de cuarț a axelor 3_z și 2_x, rezultă existența a încă două elemente de simetrie — axele 2_y și 2_u. Astfel, dacă o axă de simetrie 2 este perpendiculară pe axa 3, atunci există în total trei axe 2, perpendiculare pe axa 3. Pe baza acestui exemplu particular se deduce teorema 1, a înmulțirii operațiilor de simetrie: dacă o axă de simetrie 2 este perpendiculară pe o axă de simetrie de ordinul n,

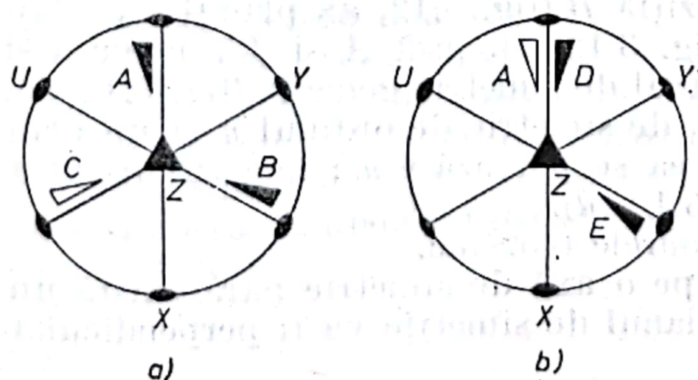


Fig. 3.10. Rezultatul aplicării succesive a două operații de simetrie:
a) $2_x 3_z = 2_u$; b) $3_z 2_x = 2_y$.

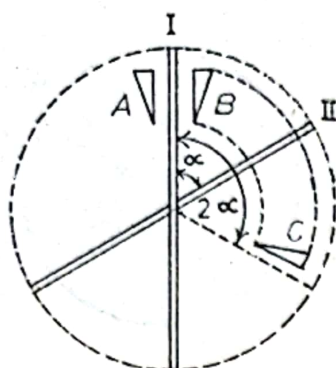


Fig. 3.11. Reflexia pe două planuri de simetrie care se intersectează este echivalentă cu o rotație în jurul unei axe de simetrie.

atunci există în total n axe 2, perpendiculare pe axa n. Combinația dintre axa de simetrie de ordinul n cu o axă de simetrie 2, perpendiculară pe ea, se notează $n2$; în cazul examinat avem combinația 32 (vezi figura 3.9).

Vom formula, în continuare, încă o serie de teoreme referitoare la înmulțirea operațiilor de simetrie. Aici sînt date numai exemple ilustrative, lămuritoare, demonstrațiile riguroase fiind cuprinse în anexa D.

T e o r e m a 2. Dreapta care este intersecția a două planuri de simetrie este totdeauna axa de simetrie a rotației cu un unghi de două ori mai mare decît unghiul dintre planuri. Demonstrația se vede din figura 3.11. Reflexia față de planul I trece triunghiul A în poziția B, iar reflexia față de planul II îl trece din poziția B în C. Dar trecerea $A - C$ se poate efectua și prin rotirea în jurul axei n cu unghiul 2α, adică $m_{II} . m_{I} = n_{2\alpha}$.

T e o r e m a 2a (reciproca teoremei 2). Rotația în jurul unei axe de simetrie poate fi înlocuită printr-o dublă reflexie față de planuri de simetrie. În acest caz unul dintre planuri se ia de-a lungul axei arbitrar, iar cel de al doilea plan trebuie să formeze cu primul un unghi egal cu jumătate din unghiul de rotire în jurul axei, și anume în sensul acestei rotații. Demonstrația este evidentă din aceeași figură, 3.11.

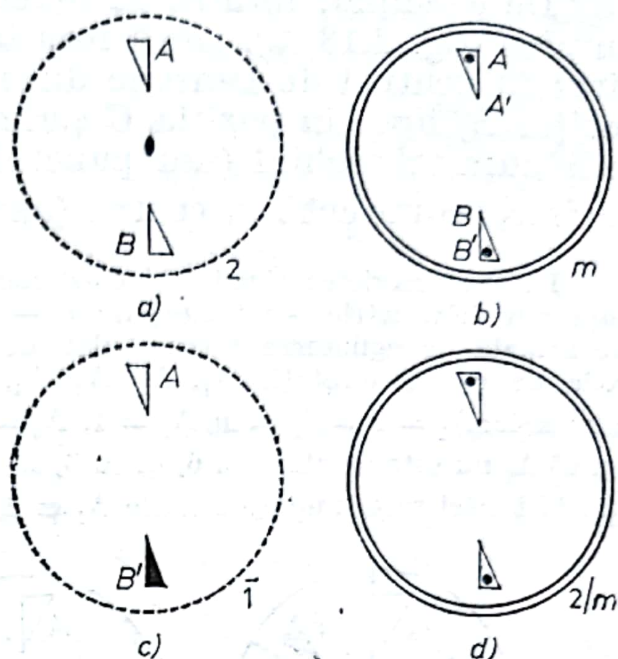
T e o r e m a 3. Punctul de intersecție a unei axe de simetrie de ordin par cu un plan de simetrie perpendicular pe ea este un centru de simetrie. În figura 3.12 axa 2_z, perpendiculară la planul m_z, duce triunghiul A în poziția B (fig. 3.12, *a*), planul m_z dă o reflexie $A - A'$, $B - B'$ (fig. 3.12, *b*), însă A și B', precum și A' și B sînt legate și de centrul de simetrie generat (fig. 3.12, *c*).

Combinația dintre o axă de simetrie de ordinul n și un plan de simetrie perpendicular pe ea se notează n/m; în cazul discutat avem combinația $2/m$ (fig. 3.12, *d*).

Analog se deduc următoarele teoreme.

T e o r e m a 3a. Dacă pe o axă de simetrie pară există un centru de simetrie, atunci planul de simetrie va fi perpendicular pe această axă.

Fig. 3.12. O axă de simetrie pară şi un plan perpendicular pe ea dau naştere unui centru de simetrie.



T e o r e m a 3b. Dacă printr-un centru de simetrie trece un plan de simetrie, atunci, prin acest centru va trece o axă pară de simetrie, perpendiculară la planul considerat.

T e o r e m a 4. Dacă după o axă de simetrie de ordinul n trece un plan de simetrie, atunci există un număr n de astfel de planuri ; această combinaţie se notează nm (se demonstrează ca şi teorema 1 ; vezi figura 3.11).

Prin înmulţirea operaţiilor de simetrie obţinem toate operaţiile deja enumerate, plus încă una nouă : produsul dintre o rotire elementară n şi inversia $\bar{1}$, indiferent de ordine ; aceasta este operaţia de simetrie denumită rotaţie elementară-inversie, $\bar{n} : \bar{1} \cdot n = n \cdot \bar{1} = \bar{n}$.

Axa în jurul căreia au loc rotaţii de inversie se numeşte *axă de simetrie de inversie.* Ca şi axele de rotaţie, axele de inversie din cristale pot fi numai de ordinele 1, 2, 3, 4 şi 6.

Dintre rotaţiile elementare-inversii fac parte două dintre operaţiile enumerate mai sus.

Acţiunea axei de inversie 1 este echivalentă cu acţiunea centrului de simetrie, iar rotaţia-inversie în jurul axei $\bar{2}$ este echivalentă acţiunii unui plan de simetrie : $\bar{2} \equiv m$. Celelalte rotaţii de inversie sînt noi.

Repetarea unor rotaţii elementare-inversii duce la următoarele rezultate :

$$\bar{3}_z^2 = 3_z \,; \quad \bar{3}_z^3 = 1 \,; \quad \bar{3}_z^4 = 3_z \,;$$

$$\bar{4}_z, \quad \bar{4}_z^2 = 2_z \,; \quad \bar{4}_z^3, \quad \bar{4}_z^4 = 1.$$

De exemplu, rotația de inversie în jurul axei $\bar{3}$, normală la un plan (fig. 3.13, *a*), adică rotația cu 120° concomitent cu oglindirea în centrul de simetrie duce triunghiul (sau punctul) *A* în poziția *B*, apoi în poziția *C* ş.a.m.d. Analog, în figura 3.13, *b* se vede cum triunghiul (sau punctul) *A*, prin rotirea cu 90° şi reflexia concomitentă în centru (axa $\bar{4}$), trece în *B*, apoi în *C* etc.

Pentru descrierea simetriei poliedrelor cristaline uneori se mai utilizează încă o operație de simetrie — *rotația-oglindire* — care este o rotație în jurul axei de simetrie urmată de oglindirea într-un plan de simetrie perpendicular pe această axă. Axele de oglindire-rotație Λ_1, Λ_2, Λ_3, Λ_4, Λ_6 sînt echivalente axelor de simetrie de inversie: $\Lambda_1 = \bar{2} = 4_2 = m$, $\Lambda_2 = \bar{1}$, $\Lambda_3 = \bar{6}$, $\Lambda_4 = \bar{4}$, $\Lambda_6 = \bar{3}$. Trebuie să remarcăm că Λ_6 nu este identică cu $\bar{6}$, ci cu $\bar{3}$, iar Λ_3, la rîndul ei, nu este identică cu $\bar{3}$, ci cu $\bar{6}$. La fel se întîmplă cu axele $\Lambda_1 \equiv \bar{2}$, iar $\Lambda_2 \equiv \bar{1}$.

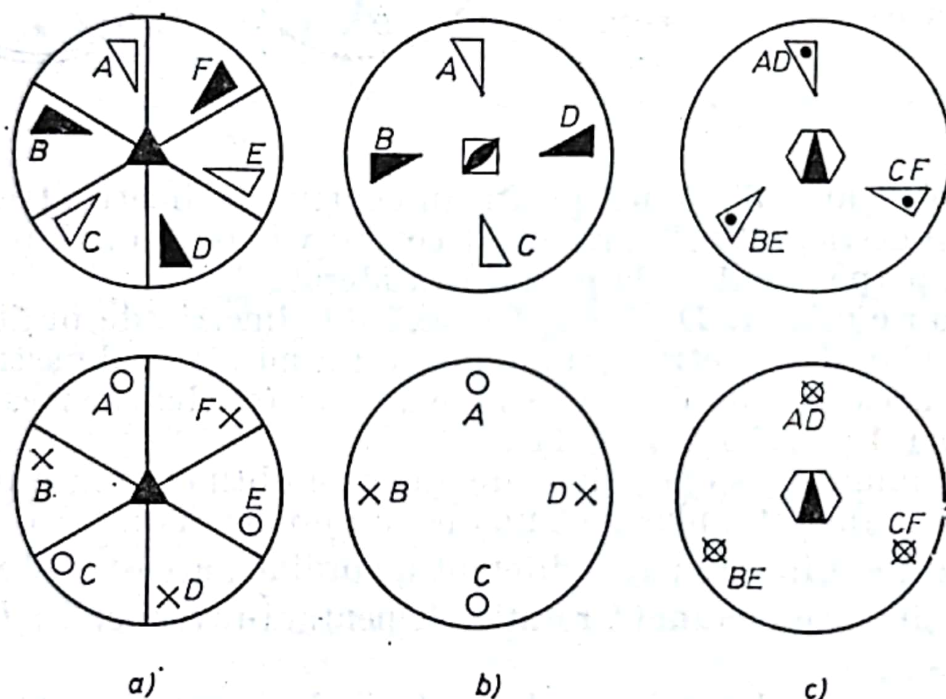


Fig. 3.13. Transformările de simetrie produse de către axele de simetrie de inversie $\bar{3}$(*a*), $\bar{4}$ (*b*), $\bar{6}$ (*c*) ale unui triunghi material (rîndul de sus) sau ale unui punct (rîndul de jos) în reprezentare standard, în proiecție stereografică.

Rotația combinată cu inversia reprezintă o rotație în jurul unei axe de simetrie şi reflexia în centrul de simetrie, aplicate simultan; aceste două operații nu se pot separa. Prin urmare, existența în cristal a unei axe de simetrie de inversie nu înseamnă că în cristal există şi un centru de simetrie şi nu contrazice existența direcțiilor polare (însă axa de inversie însăşi, evident, nu va fi polară!).

Aşadar, simetria poliedrelor cristaline poate fi descrisă complet cu ajutorul elementelor de simetrie *m*, $\bar{1}$, 2, 3, 4, 6, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$.

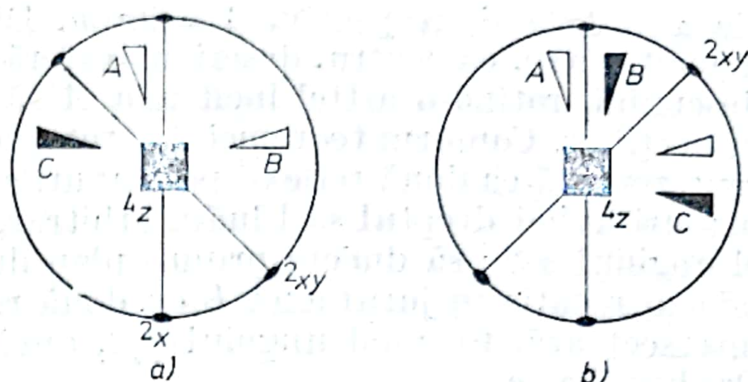


Fig. 3.14. Teorema lui Euler: $2_z \cdot 4_z = 2_{xy}$; $4_z \cdot 2_x = 2_{xy}$.

Terminînd întocmirea listei elementelor de simetrie, să ne întoarcem la teoremele privind înmulţirea lor.

T e o r e m a 5 (teorema lui Euler). Rezultanta a două axe de simetrie concurente este o a treia axă, care trece prin punctul lor de intersecţie.

Figura 3.14 serveşte pentru ilustrarea acestei teoreme. Axa 4_z realizează trecerea $A \to B$, axa 2_x — $B \to C$, însă trecerea $A \to B$ se poate face dintr-odată, prin rotirea în jurul axei 2_{xy}, adică

$$2_x \cdot 4_z = 2_{xy}.$$

Aceste operaţii se pot aplica într-o altă ordine:

operaţia 2_x produce trecerea $A \to B$,
,, 4_z ,, ,, $B \to C$,
,, $2_{\bar{x}y}$,, ,, $A \to C$,

adică

$$4_z \cdot 2_x = 2_{\bar{x}y}.$$

Să ilustrăm teorema lui Euler cu ajutorul proiecţiei. În figura 3.15, A şi B sînt urmele axelor de simetrie cu unghiurile de rota-

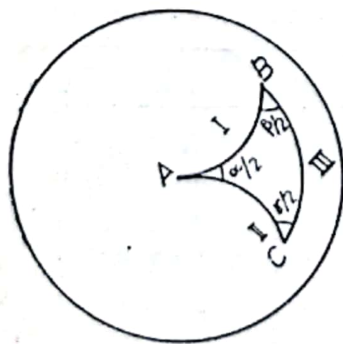


Fig. 3.15. Ilustrarea teoremei lui Euler cu ajutorul unei proiecţii stereografice.

ţie $\alpha = 2\pi/n$ şi, respectiv, $\beta = 2\pi/m$. Din punctul de intersecţie a acestor axe, ca centru, descriem o sferă şi o proiectăm în planul desenului, rotind-o astfel încît axa A să cadă în centrul cercului proiecţiilor. Conform teoremei 2a, rotaţia în jurul axei A poate fi reprezentată ca două reflexii pe planurile de simetrie, primul dintre planuri avînd dreptul să-l luăm arbitrar, iar al doilea va face cu el unghiul $\alpha/2$; să ducem primul plan după axa B. Analog vom înlocui rotaţia în jurul axei B cu două reflexii pe planuri care se intersectează, formînd unghiul $\beta/2$, ducînd primul plan după A. Produsul este

$$m_{\text{I}} \cdot m_{\text{II}} = 1,$$

adică rezultatul a două reflexii succesive faţă de acelaşi plan face ca figura să rămînă pe loc. Rămîn cele două planuri, m_{II} şi m_{III}, care se intersectează sub unghiul $\gamma/2$, fiind, conform teoremei 2, echivalente cu axa de simetrie C, cu unghiul de rotaţie $\gamma = 2\pi/p$. Teorema este demonstrată.

Mai sus s-a arătat că axele de simetrie din cristale pot fi numai de ordinul 2, 3, 4 şi 6. Cîte combinaţii ale acestor axe sînt posibile într-un cristal?

Efectuînd în figura 3.15 toate rotaţiile posibile în jurul axelor A, B, C (A, A^2, A^3, . . ., B, B^2, B^3, . . .etc.), obţinem, evident, pe sferă n ieşiri ale axei A, m ieşiri ale axei B şi p ieşiri ale axei C, iar ducînd planurile de simetrie dintre ele, care pe sferă se reprezintă ca arce de cercuri mari, vom obţine pe suprafaţa sferei o reţea de triunghiuri sferice. Din trigonometria sferică se ştie că suma unghiurilor unui triunghi sferic, S, este

$$180° \leqslant S \leqslant 3 \cdot 180°.$$

Apoi, din condiţia ca axele A, B, C să fie numai axe 2, 3, 4, 6, rezultă că unghiurile dintre laturile triunghiurilor pot fi numai de 90°, 60°, 45°, 30°. Prin urmare, pot fi stabile numai combinaţiile de axe de simetrie enumerate mai jos:

Unghiurile	Suma unghiurilor	Combinaţia de axe	Sistemul cristalografic
90°, 90°, 90°	270°	2, 2, 2	Rombic
60°, 90°, 90°	240°	3, 2, 2	Trigonal
45°, 90°, 90°	225°	4, 2, 2	Tetragonal
30°, 180°, 180°	390°	6, 2, 2	Hexagonal
60°, 60°, 90°	210°	3, 3, 2	
45°, 60°, 90°	195°	4, 3, 2	Cubic

În ultima coloană sînt date denumirile sistemelor cristalografice, explicate în paragraful care urmează.

§ 4. CATEGORII, SISTEME ȘI SINGONII CRISTALOGRAFICE

În funcție de simetria geometrică, de formele de creștere și de simetria proprietăților fizice, cristalele se împart în categorii, sisteme și singonii.

Înainte de a face cunoștință cu categoriile, să introducem noțiunea de direcții particulare într-un cristal. Direcția singulară, ce nu se mai repetă într-un cristal, se numește *direcție particulară* sau *direcție unică* (definiția nu se referă numai la cristale, ci la orice poliedru simetric). De exemplu, axa 6 dintr-un fulg de zăpadă, axa 4 dintr-o piramidă tetraedrică și dintr-o prismă tetraedrică sau axa 6 dintr-un creion hexaedric sînt direcții particulare : prin nici unul dintre celelalte elemente de simetrie, existente în aceste poliedre, nu le putem repeta astfel încît să obținem încă o axă 4 sau o a doua axă 6.

Într-un cub axa 4 nu este unica ; sînt trei asemenea axe și fiecare dintre ele poate fi confundată cu alta de același fel, de pildă, prin reflexia pe oricare dintre cele șase planuri de simetrie diagonale ale cubului. Nu numai axele de simetrie, ci oricare direcție din cub se repetă obligatoriu simetric, cu alte cuvinte într-un cub nu există direcții unice. Direcțiile care se repetă într-un cristal, legate între ele prin elemente de simetrie, se numesc *direcții simetric echivalente.*

În funcție de numărul de direcții particulare (unice) și de axele de simetrie existente, cristalele se împart în trei categorii :

categoria superioară — nu există direcții unice, există cîteva axe de simetrie de ordin superior lui 2 (de exemplu, cubul) ;

categoria medie — o singură direcție particulară, care coincide cu o axă de simetrie unică de ordinul 3, 4 sau 6, adică mai mare ca 2 (de exemplu, prisma trigonală, prisma tetragonală și prisma hexagonală) ;

categoria inferioară are cîteva direcții particulare, nu există axe de ordin mai mare decît 2 (de exemplu, așa-numita prismă rombică, ce are trei axe 2).

În categoria superioară sînt incluse cristalele care au cîteva axe de simetrie de ordin superior lui 2 ; în particular, există obligatoriu patru axe 3 și, în afară de ele, mai pot exista trei axe 4 sau $\bar{4}$. Acestea sînt cristalele cu simetrie superioară. Ele nu au direcții particulare. Într-un cristal din categoria superioară, oricărei direcții îi corespund alte direcții simetric echivalente.

După direcţiile simetric echivalente, proprietăţile cristalului trebuie să fie aceleaşi, încît anizotropia proprietăţilor cristalelor din categoria superioară se manifestă cel mai slab. Proprietăţile fizice ale cristalelor, exprimate printr-un tensor de rangul doi (v. cap. 3), adică conductibilitatea termică, permitivitatea dielectrică şi altele sînt izotrope, izomerice în aceste cristale.

Din categoria medie fac parte cristalele care au o singură direcţie singulară, şi anume o axă de simetrie 3, 4 sau 6 (simplă sau de inversie). La aceste cristale anizotropia proprietăţilor fizice se manifestă mult mai categoric decît la cristalele din categoria superioară.

Din categoria inferioară fac parte cristalele care nu au axe de simetrie de ordin mai mare ca 2 şi la care există cîteva direcţii particulare. Acestea sînt cristalele cele mai puţin simetrice, avînd cea mai puternică anizotropie a proprietăţilor.

La rîndul lor, cele trei categorii se subîmpart în şapte sisteme după criteriul simetriei caracteristice a lor şi după combinaţiile dintre axele de simetrie (v. § 3).

Categoria inferioară se împarte în trei sisteme* :

sistemul *triclinic* („cu trei înclinări") — nu există nici axe, nici planuri de simetrie ;

sistemul *monoclinic* („uniînclinat") — există numai o singură axă de simetrie de ordinul doi, sau un singur plan de simetrie, sau şi o axă şi un plan ;

sistemul *rombic* — cristalul are mai mult de o axă de ordinul doi sau mai mult de un plan de simetrie.

Categoria medie se subdivide tot în trei sisteme :

sistemul *trigonal* — o singură axă principală de simetrie 3 sau $\bar{3}$;
sistemul *tetragonal* — „ „ „ „ „ „ 4 sau $\bar{4}$;
sistemul *hexagonal* — „ „ „ „ „ „ 6 sau $\bar{6}$.

Categoria superioară constă dintr-un singur sistem — sistemul *cubic* — care se caracterizează prin existenţa a patru axe de simetrie de ordinul trei.

În loc de împărţirea categoriilor în şapte sisteme, ele se pot împărţi în şase singonii.

Noţiunea de singonie coincide cu noţiunea de sistem pentru toate sistemele, în afară de sistemele trigonal şi hexagonal. Împărţirea în singonii determină alegerea sistemului de coordonate

---

* Termenii cristalografici sînt formaţi, în cea mai mare parte, din cîteva cuvinte greceşti: mono — 1, di — 2, tri — 3, tetra — 4, penta — 5, hexa — 6, hepta — 7, octo — 8, deca — 10, dodeca — 12, edra — faţă, gonia — unghi, pinax — placă, clino — înclinaţie, scalena — oblic, strîmb, trapezion — masă, sin — asemănător.

Tabelul 4.1

Împărțirea cristalelor în categorii, singonii și sisteme

Categoria	Numărul de direcții unice	Singonia	Sistemul	Simetria caracteristică	Forma celulei elementare	Axele de coordonate	Distribuția aleasă pentru axe	Parametrii care caracterizează substanța
Inferioară	Cîteva	Triclinică	Triclinic	Nu există	Paralelipiped oblic	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \neq \gamma \neq 90°$	După muchiile cristalului, $c < b < a$	$a : b : c$ α, β, γ
		Monoclinică	Monoclinic	Axă 2 sau plan de simetrie	Prismă dreaptă cu paralelograme la bază	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90° \neq \gamma$	1. Axa Y, paralelă cu axa 2 sau normală la planul m 2. Axă Z paralelă cu axa 2 sau normală la planul m $c < b < a$	$a : b : c, \gamma$ $a : b : c, \beta$
		Rombică	Rombic	Trei axe 2 sau trei planuri de simetrie	Paralelipiped drept	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	Axe paralele cu 2 sau normale la m, $c < b < a$	$a : b : c$
Medie	Una	Hexagonală	Hexagonal Trigonal *	Axă 6 sau $\bar{6}$ Axă 3 sau $\bar{3}$	Prismă cu baza sub formă de romb cu unghiul de 120°	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90°$ $\gamma = 120°$	Axa principală paralelă cu Z, celelalte în planul XY	$c : a$
		Tetragonală	Tetragonal	Axă 4 sau $\bar{4}$	Prismă cu baza pătrat	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90°$		
Superioară	Nu există	Cubică	Cubic	Patru axe 3	Cub	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	Axe paralele cu cele trei axe 4 (sau $\bar{4}$, sau 2)	a

* În forma rombică: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$. Celula elementară este un romboedru. Parametrul caracteristic al substanței: a, α.

cristalografic și a tripletului de vectori ai bazei, care-l caracterizează, $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ sau, altfel spus, alegerea metricei, a, b, c, α, β, γ (v. fig. 1.7).

Axele de coordonate cristalografice se aleg totdeauna după axele de simetrie sau după normalele la planurile de simetrie. Dacă nu există elemente de simetrie corespunzătoare, ca în singoniile monoclinică și triclinică, axele de coordonate se aleg după muchiile poliedrului cristalin sau după șirurile rețelei cristaline.

Celulele elementare primitive, care corespund fiecărei singonii sînt date în prima coloană a tabelului 9.1 și sînt cuprinse în tabelul 4.1.

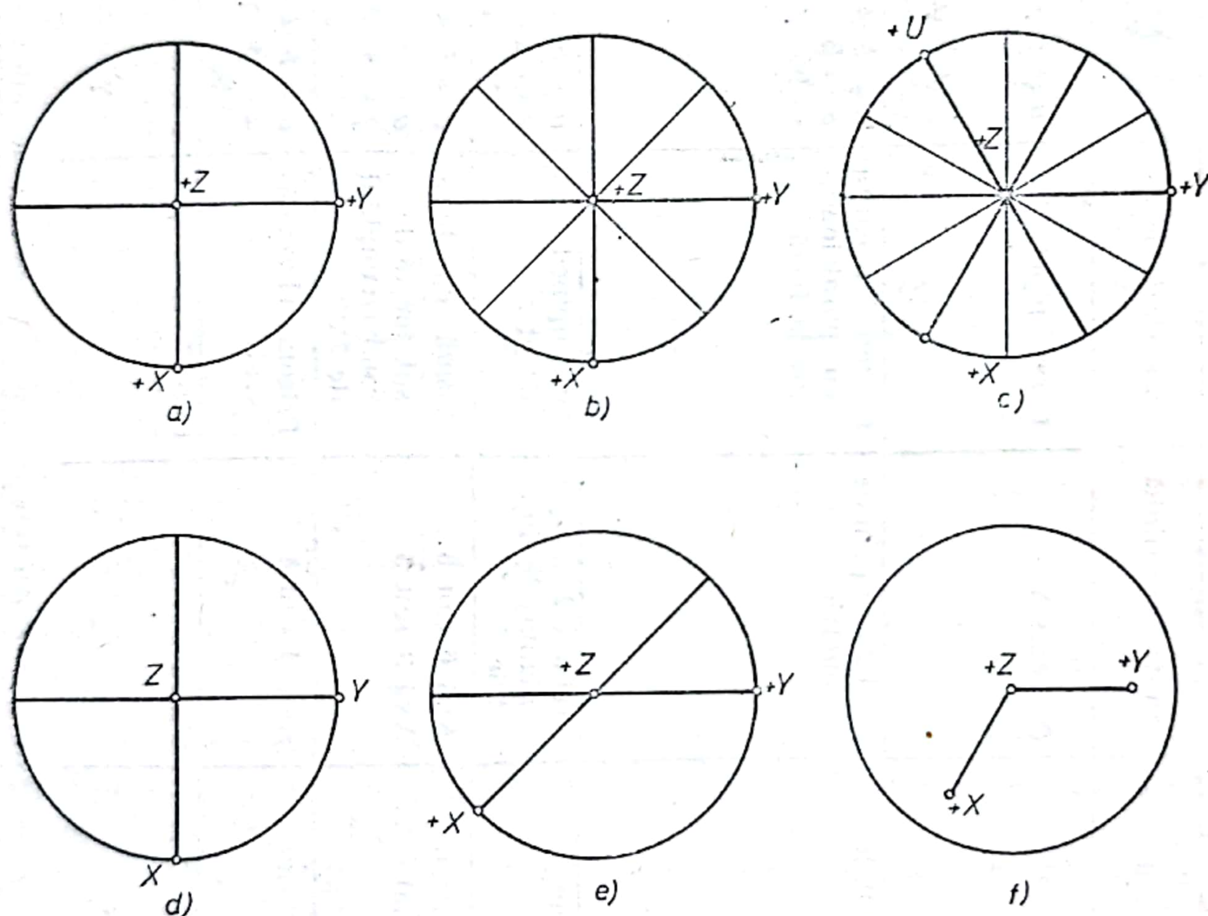


Fig. 4.1. Regulile de aranjare cristalografică a unui sistem (proiecție stereografică): cubic (*a*), tetragonal (*b*), trigonal și hexagonal (*c*), rombic (*d*), monoclinic (*e*) și triclinic (*f*).

În figura 4.1 se arată cum se aleg axele de coordonate în cristalele din cele șapte sisteme.

În categoria superioară se află o singură singonie, cea cubică. Aceasta este unica singonie, astfel încît simetriei sale îi corespunde sistemul de coordonate cartezian obișnuit, $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$. Celula elementară este un cub. Drept axe de coordonate

se iau trei axe 4, sau $\bar{4}$, sau 2, rectangulare. Apoi cristalele din singonia cubică au obligatoriu patru axe 3 (diagonalele cubului); acest fapt este cel mai caracteristic semn al cristalelor cubice. Noţiunile de sistem cubic şi singonie cubică coincid.

În categoria medie intră două singonii:

singnia *tetragonală* — axă principală 4 sau $\bar{4}$;

singonia *hexagonală* — axă principală 6, sau $\bar{6}$, sau 3, sau $\bar{3}$.

În aceste singonii, totdeauna ca axă principală se alege axa Z (X_3), axele $X(X_1)$ şi $Y(X_2)$ găsindu-se în planul perpendicular pe axa principală. Segmentele de pe axele X şi Y sînt aici egale ($a = b$); de aceea, metrica cristalelor din categoria medie se caracterizează prin raportul c/a; acest raport este diferit pentru substanţe diferite, el fiind o constantă caracteristică substanţei.

Pentru cristalele tetragonale noţiunile de sistem şi de singonie coincid. În ceea ce priveşte cristalele din sistemele* hexagonal şi trigonal, ele pot fi descrise într-un singur sistem de coordonate, aşa-numitul sistem hexagonal de coordonate; unica axă 3, sau $\bar{3}$ (trigonală) sau 6, sau $\bar{6}$ (hexagonală) se ia drept axă Z. Axele X şi Y se află într-un plan perpendicular pe axa Z, făcînd între ele un unghi de 120°; pentru simetrie se mai adaugă la ele o a patra axă, U, în acelaşi plan şi tot la 120°, adică se utilizează un sistem cu patru axe de coordonate. Celula elementară a acestei singonii este compusă din trei celule primitive (v. tab. 9.1).

Pentru reprezentarea acestor cristale se poate utiliza şi un sistem de coordonate cu trei axe (romboedric), ale cărui axe sînt paralele cu muchiile unui romboedru elementar (v. § 9).

În singonia rombică (ortorombică) ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$) se utilizează un sistem de coordonate rectangular cu segmente inegale, fiind obligatorie condiţia $c < a < b$. Axele de coordonate se iau după axele 2 sau perpendiculare la planul de simetrie.

În singonia monoclinică $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$, axa Y fiind paralelă cu axa 2 sau perpendiculară la m, axele X şi Z se află în planul normal la Y, dar atît dispunerea lor cît şi unghiul dintre ele nu sînt date prin elementele de simetrie; ele se aleg după şirurile de atomi din structura cristalului sau după muchiile formei exterioare a cristalelor. Este posibilă şi o altă

---

* Din nefericire, între noţiunile de singonie şi sistem nu se face o distincţie netă în literatură. Uneori sistemul trigonal este considerat ca un subsistem al sistemului hexagonal, alteori se confundă noţiunea de sistem cu noţiunea de singonie şi atunci se vorbeşte despre şapte singonii, printre care singonia hexagonală şi singonia trigonală. În toate cazurile este vorba nu despre diferenţe principiale, ci doar despre o terminologie insuficient de precisă.

dispunere a axelor — aşa-numita a doua dispunere a singoniei monoclinice, cînd axa 2 sau normala la m este paralelă cu axa Z.

În sistemul triclinic ($a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$) nici o axă nu este dată prin elemente de simetrie, ci axele se aleg după muchiile cristalului, cu condiţia obligatorie $c < a < b$.

Pentru categoria inferioară noţiunile de singonie şi sistem coincid.

Împărţirea cristalelor pe categorii, sisteme şi singonii este cuprinsă în tabelul 4.1. Menţionăm că în cristalografie sînt extrem de importante regulile de aranjare, adică dispunerea elementelor de simetrie după anumite axe de coordonate, deoarece de aceasta depinde univocitatea indexării.

§ 5. GRUPURI (CLASE) PUNCTUALE DE SIMETRIE A CRISTALELOR

Mulţimea operaţiilor de simetrie ale unui poliedru cristalin ideal, adică a transformărilor în urma aplicării cărora acest poliedru coincide cu el însuşi, formează o *clasă* (specie) *de simetrie* sau un *grup punctual de simetrie a cristalului*. Numărul de operaţii de simetrie distincte pe care le cuprinde grupul poartă numele de *ordinul grupului*.

Să examinăm cele mai simple proprietăţi ale unor astfel de grupuri.

Dacă o anumită operaţie transformă poliedrul cristalin în el însuşi, poliedrul se va transforma în el însuşi, evident, şi prin repetări ale acestei operaţii. Deoarece rezultatul repetărilor succesive ale unei operaţii de simetrie se notează ca exponent al acestei operaţii, într-un grup intră, împreună cu orice operaţie, şi toate puterile ei posibile. Acest fapt nu înseamnă că asemenea puteri sînt oricît de multe : repetarea oricărei operaţii de simetrie cristalografică punctuală aduce pînă la urmă cristalul în poziţie iniţială, adică o anumită putere a unei asemenea operaţii este egală cu identitatea

$$\bar{1}^2 = 1,\ m^2 = 1,\ 2^2 = 1,\ 3^3 = 1,$$

$$4^2 = 1,\ 6^6 = 1,\ \bar{3}^6 = 1,\ \bar{4}^4 = 1,$$

$$\bar{6}^6 = 1.$$

Grupurile generate de un singur element de simetrie, adică cele care constau din puterile unei aceleiaşi operaţii, se numesc

grupuri *ciclice*. Grupurile ciclice cristalografice se notează cu simbolurile elementelor de simetrie care le-au generat. Ele pot fi de ordinul unu, 1, de ordinul doi, $\bar{1}$, m, 2, de ordinul trei, 3, de ordinul patru, 4, $\bar{4}$, de ordinul șase, 6, $\bar{3}$, $\bar{6}$.

Dacă o anumită operație aduce un poliedru în coincidență cu el însuși, fiind deci o operație de simetrie, atunci și o operație care îl aduce în poziția inițială va fi tot o operație de simetrie; ea se numește operație *inversă* celei inițiale (operația inițială fiind, la rîndul ei, inversă față de operația inversă). Operația inversă se notează ca puterea minus unu a operației inițiale.

Produsul dintre operații reciproc inverse este identitatea, *1*; evident, orice pereche de operații al căror produs este identitatea sînt inverse una în raport cu alta. Exemple de operații inverse una față de alta:

$$\bar{1}\cdot\bar{1}=1,\quad m\cdot m=1,\quad 2\cdot 2=1,\quad 3^2\cdot 3=1,$$

$$4^3\cdot 4=1,\quad 6^5\cdot 6=1,\quad \bar{3}\cdot\bar{3}^5=1,\quad \bar{4}\cdot\bar{4}^3=1,$$

$$\bar{6}\cdot\bar{6}^5=1.$$

După cum se vede, unele operații ($\bar{1}$, m, 2) sînt inversele lor.

Dacă fiecare dintre două operații date transformă un poliedru cristalin în el însuși, atunci poliedrul se va transforma în el însuși și prin aplicarea succesivă a ambelor operații: împreună cu oricare pereche de operații, într-un grup intră și produsul lor (sau ambele produse, dacă ele nu coincid).

Fie ca printre operațiile de simetrie ale unui anumit poliedru cristalin să intre, de exemplu, 2_y și m_y. Conform teoremei 1, § 3, o operație de simetrie va fi și $\bar{1}$. Împreună cu identitatea, aceste operații formează un grup, deoarece toate înmulțirile posibile dintre ele nu conduc la nici un fel de operații diferite de ele; simbolul acestui grup, $2/m$, va fi explicat în paragraful următor. Tabla înmulțirii grupurilor punctuale $2/m$, 222, $mm2$ și a grupului neciclic abstract de ordinul patru arată astfel:

$2/m$	1	2_y	m_y	$\bar{1}$
1	1	2_y	m_y	$\bar{1}$
2_y	2_y	1	$\bar{1}$	m_y
m_y	m_y	$\bar{1}$	1	2_y
$\bar{1}$	$\bar{1}$	m_y	2_y	1

222	1	2_x	2_y	2_z
1	1	2_x	2_y	2_z
2_x	2_x	1	2_z	2_y
2_y	2_y	2_z	1	2_x
2_z	2_z	2_y	2_x	1

$mm2$	1	m_x	m_y	2_z
1	1	m_x	m_y	2_z
m_x	m_x	1	2_z	m_y
m_y	m_y	2_z	1	m_x
2_z	2_z	m_y	m_x	1

abstr.	1	a	b	c
1	1	a	b	c
a	a	1	c	b
b	b	c	1	a
c	c	b	a	1

Toate produsele din grupul $2/m$ sînt comutative, adică nu depind de ordinea factorilor; aceasta rezultă din faptul că tabla înmulțirii grupului este simetrică față de diagonala principală. Astfel, $2/m$ este un grup comutativ. Evident, toate grupurile ciclice sînt comutative (dar nu toate grupurile comutative sînt ciclice).

Grupurile în care nu toate produsele sînt comutative se numesc grupuri *necomutative*. Așa este, spre exemplu, grupul simetriei cristalelor de cuarț, 32, generat de axa 3 și axa perpendiculară pe ea, 2. În § 3 s-a arătat că $3_z 2_x \neq 2_x 3_z$. Tabla înmulțirii acestui grup nu este simetrică față de diagonala principală (v. § 3).

Grupul 32 este un exemplu de grup generat de două operații de simetrie. Din astfel de grupuri fac parte și grupurile de simetrie ale piramidei triunghiulare regulate, $3m$, și ale piramidei tetraedrice regulate, $4m$. Unele grupuri cristalografice iau naștere în urma a trei operații; astfel este, de pildă, grupul de simetrie al piramidei tetraedrice, $4/mmm$. Operațiile care generează un grup se numesc uneori *generatoarele grupului*. Generatoarele tuturor grupurilor cristalografice sînt cuprinse în tabelul 45.2.

Se poate întîmpla ca o parte dintre operațiile care intră într-un grup să formeze ele însele un grup (se înțelege, de ordin inferior celui al grupului inițial); acest grup se numește *subgrup* în raport cu cel inițial, pe cînd grupul inițial este numit *supragrup* în raport cu subgrupul.

Astfel, grupul $2/m$ are trei subgrupuri (între acolade sînt trecute operațiile care intră în grup): $2\{1,\ 2_y\}$, $m\{1,\ m_y\}$ și $\bar{1}\{1,\ \bar{1}\}$, iar grupul 32 are patru subgrupuri: $3\{1,\ 3_z,\ 3_z^2\}$, $2\{1,\ 2_x\}$, $2\{1,\ 2_y\}$, $2\{1,\ 2_z\}$. Faptul că grupul $\bar{1}$ este un subgrup al grupului $2/m$ se notează în felul următor: $\bar{1} \subset 2/m$. Grupul 1 constînd din unica operație 1, este subgrup al oricărui grup, așa că adesea el se numește *subgrupul banal* și se omite la scrierea grupului.

Raportul dintre ordinul grupului și ordinul subgrupului se numește *indice al subgrupului*; astfel, în raport cu grupul 32, grupul 3 este un subgrup cu indicele 2, iar grupul 2, un subgrup cu indicele 3; față de grupul $2/m$, grupurile 2, m și $\bar{1}$ sînt subgrupuri cu indicele 2.

Ansamblul tuturor operațiilor care intră concomitent în două grupuri se numește *intersecția* acestor grupuri. Nu este greu de

demonstrat că intersecția a două grupuri este tot un grup; de aici rezultă că intersecția a două grupuri este cel mai general subgrup al acestor grupuri. La aflarea intersecției a două grupuri punctuale trebuie să ținem seama de poziția reciprocă a elementelor de simetrie din ele. Astfel, dacă grupurile 32 și $2/m$, examinate anterior, sînt raportate la același sistem de coordonate, atunci intersecția acestor grupuri va fi grupul $2\{1, 2_y\}$. Notația corespunzătoare este $32 \cap 2/m = 2$, sau, dacă vrem să subliniem orientarea elementelor de simetrie, $3_z 2_y \cap 2_y/m_y = 2_y$.

Grupurile punctuale de simetrie a cristalelor constituie una dintre realizările posibile ale grupurilor matematice. În matematică *grupul* este mulțimea G de elemente $a, b, c, \ldots$ (faptul că a este un element ce aparține mulțimii G se notează $a \in G$) care se supune următoarelor axiome:

1) pentru oricare două elemente (nu neapărat diferite) ale grupului $a \in G$ și $b \in G$, luate într-o anumită ordine, există un singur element, $c \in G$, numit *produsul* lor: $c = ab$;

2) pentru toate elementele grupului este satisfăcută legea asociativității: $a(bc) = (ab)c$;

3) într-un grup există *elementul unitate*, $1 \in G$, astfel încît prin înmulțirea lui la dreapta sau la stînga cu orice element $a \in G$, acesta va rămîne neschimbat: $a1 = 1a = a$;

4) pentru orice element $a \in G$ există *elementul invers*, $a^{-1} \in G$, astfel încît $a^{-1}a = aa^{-1} = 1$.

Comparînd aceste axiome cu proprietățile grupurilor punctuale, examinate mai sus, vedem că grupurile punctuale se supun axiomelor enumerate, fiind astfel un caz particular al grupurilor matematice.

Dacă grupul are numai proprietățile enumerate în axiome, atunci el se numește grup *abstract*. Un grup abstract este complet determinat dacă este dată tabla înmulțirii lui.

Grupurile punctuale au, în afară de proprietățile enumerate în axiome, și alte nenumărate proprietăți: ele pot fi centrosimetrice sau necentrate, holoedrice și meroedrice, fiecare dintre ele aparținînd uneia sau alteia dintre categorii, sisteme, singonii etc. (aceste proprietăți ale lor vor fi examinate în § 14).

Grupurile punctuale cristalografic diferite pot fi abstract identice, adică să aibă aceleași table de înmulțire (Belova, Belov, Șubnikov, 1948). Astfel de grupuri punctuale se numesc grupuri *izomorfe*. Tuturor grupurilor punctuale, cristalografic diferite, dar izomorfe între ele, le corespunde unul și același grup abstract; astfel sînt, de exemplu, grupurile comutative $2/m$, 222 și $mm2$. De altfel, grupurile izomorfe sînt date în figura 14.5.

Pentru notarea claselor (a grupurilor punctuale) cristalografice de simetrie se utilizează simboluri care au la bază terminologia de la înmulțirea operațiilor de simetrie.

În notarea internaţională sînt acceptate următoarele simboluri : n — axă de simetrie de ordinul n ($n = 2, 3, 4, 6$) (de fapt, în codul internaţional această axă se notează cu X sau cu X_n; noi am înlocuit această notaţie cu simbolul n, deoarece cu X notăm peste tot prima axă de coordonate), $\bar{n}$ — axă de simetrie de inversie, de ordinul n, m — plan de simetrie, nm — axă de simetrie de ordinul n şi m planuri de simetrie ce trec prin ea (vezi teorema 4, § 3), $\frac{n}{m}$, n/m — axă de simetrie de ordinul n şi plan de simetrie perpendicular pe ea ; dacă n este par, atunci, conform teoremei 3, mai există şi un centru de simetrie ; $n2$ — axă de simetrie de ordinul n şi n axe de ordinul 2, perpendiculare pe ea (vezi teorema 1) ; $\frac{n}{m}m$, sau n/mmm — axă de simetrie de ordinul n şi planuri paralele şi perpendiculare faţă de ea. În simbolul internaţional al clasei de simetrie se notează numai elementele generatoare ale simetriei — planurile sau axele ; cunoscînd teoremele relative la combinaţia elementelor de simetrie, se poate reprezenta întreaga mulţime de elemente de simetrie ale unei anumite clase ; o importanţă deosebită o are ordinea de scriere :

Tabelul 5.1

Ordinea poziţiilor în simbolurile grupurilor punctuale

Singonia	Poziţia în simbol		
	I	II	III
Triclinică	Un singur simbol care corespunde oricărei direcţii din cristal		
Monoclinică	O axă 2 sau normala la m, paralelă cu axa X_2 (prima structură) sau paralelă cu axa X_3 (a doua structură)		
Rombică	O axă 2 sau normala la m paralelă cu		
	axa X_1	axa X_2	axa X_3
Hexagonală * Tetragonală	Axă principală de simetrie	Axe 2 sau normale la m după	
		direcţiile coordonatelor	direcţiile diagonalelor
Cubică	Elementele de simetrie ale coordonatelor	3	Elementele de simetrie diagonale

* În structura romboedrică, axa principală este după <111>, axele 2 sau normalele la planuri sînt paralele cu trei direcţii <110> şi cu trei <112>. Aici parantezele în unghi desemnează totalitatea direcţiilor (v. §12).

sensul unei cifre sau al unei litere, care înseamnă un element de simetrie, depinde de poziția în care este scris în reprezentare. Regulile de scriere a simbolurilor internaționale ale grupurilor punctuale sînt sintetizate în tabelul 5.1. În cadrul notării se impune respectarea strictă a regulilor edificiului cristalografic (v. fig. 4.1.).

În notarea internațională se deosebesc elementele de simetrie „de coordonate'' și „diagonale''; planurile sau axele de coordonate sînt paralele cu planurile de coordonate, iar cele diagonale sînt paralele cu bisectoarele unghiurilor dintre ele. Utilitatea unei asemenea subîmpărțiri și diferențieri ierarhice între elementele de simetrie, de coordonate și diagonale, vor deveni clare în cadrul analizei simetriei microscopice a cristalelor (§ 9).

Dintre simbolurile tuturor claselor categoriei medii, pe primul loc se află axa principală de simetrie, care este după axa Z, pe al doilea, elementele de simetrie coordonate din planul XY, pe al treilea, elementele de simetrie diagonale din același plan. De exemplu, simbolul $4mm$ desemnează: existența axei 4_z, a două planuri coordonate de simetrie și două planuri de simetrie, care conțin axa 4_z și bisectoarele unghiurilor dintre axele X și Y. Acest simbol se poate scrie și prescurtat: $4mm \equiv 4m$, deoarece din teorema 4 rezultă clar că dacă există un singur plan m după axa 4, atunci vor exista în total patru astfel de planuri.

Cifra 3 din simbolul internațional al unui grup punctual, pentru cristalele din categoria superioară (singonia cubică), pe locul al doilea, desemnează convențional existența a patru axe 3, spre deosebire de cifra 3 pe locul întîi, care desemnează existența unei singure axe particulare — axa 3 — pentru cristalele din sistemul trigonal. Existența a patru axe 3, care trec după bisectoarele unghiurilor de coordonate, este caracteristică pentru toate clasele sistemului cubic. Axele de simetrie 4, dacă există, coincid totdeauna cu axele de coordonate. Axele de simetrie 2 și planurile pot fi de coordonate sau diagonale. Dacă numărul de axe de simetrie 2 sau de planuri m este egal cu trei, atunci aceste elemente sînt de coordonate, dacă numărul lor este de șase, atunci ele sînt diagonale. În sfîrșit, dacă sînt nouă, atunci trei dintre ele sînt de coordonate, iar șase diagonale. Drept elemente de simetrie de coordonate și diagonale se scriu, de preferință, planurile, iar axele de simetrie sînt incluse în simbol numai dacă nu există planuri.

De exemplu, simbolul $m3$ se descifrează în modul următor: patru axe 3, după bisectoarele unghiurilor de coordonate, și trei planuri de simetrie, de coordonate; conform teoremei 2, la intersecțiile planurilor vor apărea trei axe 2, iar conform teoremei 3, la intersecția lor se adaugă centrul. Să comparăm simbolul $3m$

cu simbolul $m3$: cifra 3, care este pe primul loc, înseamnă o singură axă principală de simetrie, de ordinul trei, adică apartenența la sistemul trigonal ; litera m, care urmează după această cifră, înseamnă trei planuri de simetrie, care trec prin axă (conținînd-o). Din acest exemplu se vede că permutarea cifrelor sau literelor într-un simbol dintr-o poziție în alta schimbă complet sensul simbolului.

În simbolistica „didactică" (simbolistica Bravais) se utilizează notațiile : plan de simetrie, P, centru de simetrie, C, axe de simetrie, L_1, L_2, L_3, L_4, L_6, axe de simetrie de inversie, $L_{\bar{1}}$, $L_{\bar{2}}$, $L_{\bar{3}}$, $L_{\bar{4}}$, $L_{\bar{6}}$ sau L_{i1}, L_{i2}, L_{i3}, L_{i4}, L_{i6}. În formula unei clase de simetrie se scriu în ordine toate elementele de simetrie — întîi axele, începînd cu ordinul cel mai mare, apoi planurile, apoi centrul. Astfel, de exemplu, simbolul $L_6\,7PC$ înseamnă : o axă L_6, șapte planuri de simetrie, un centru de simetrie. Conform teoremei 4, după axa L_6 pot trece numai șase planuri, cel de al șaptelea plan de simetrie trebuind să se deosebească de celelalte șase prin dispunerea lui ; existența centrului de simetrie, $C(\bar{1})$, înseamnă, conform teoremei 3a, că acest plan este perpendicular pe axa L_6 (6). Analog se citesc celelalte formule de simetrie.

În simbolistica Schoenflies se utilizează următoarele notații : C_n — o singură axă de simetrie de ordinul n, D_n — o singură axă de simetrie de ordinul n și n axe 2, perpendiculare pe ea. Axa unică se consideră totdeauna verticală, adică axa Z. Dacă există mai multe axe, atunci se consideră axă verticală cea de ordinul cel mai mare. Indicii v, h și d reprezintă planurile de simetrie adăugate axei verticale respective : v — verticale, h — orizontale, d — diagonale, iar T — axele de simetrie ale tetraedrului cubic și O — axele de simetrie ale octaedrului cubic.

Prin urmare, C_n înseamnă o singură axă verticală, polară, de ordinul n, C_{nv} — o singură axă polară verticală de ordinul n și n planuri de simetrie ce trec prin ea, C_{nh} — o singură axă n și un plan de simetrie perpendicular pe ea, D_n — o singură axă verticală de ordinul n și n axe 2, perpendiculare pe ea, D_{nh} — o singură axă verticală de ordinul n și un plan de simetrie perpendicular pe ea ; S_n — o singură axă verticală de rotație-oglindire de ordinul n (uneori se utilizează notația C_{ni}, unde i este semnul axei de inversie : $S(S_{(1)}) = \bar{2}$, $S_2 = C_i = \bar{1}$, $S_3 = C_{3h} = \bar{6}$, $S_4 = 4$, $S_6 = C_{3i} = \bar{3}$), S_n — o singură axă de inversie verticală de ordinul n ; $V = D_2$ — o combinație de trei axe de ordinul doi, perpendiculare între ele, $V_h = D_{2h}$ — trei axe doi, reciproc perpendiculare și planurile perpendiculare pe fiecare dintre aceste axe ; $V_d = D_{2d}$ — trei axe 2 reciproc perpendiculare și planurile diagonale ; T — axele de simetrie ale tetraedrului, T_d — axele de simetrie ale tetrae-

drului și planurile diagonale, T_h — axele de simetrie ale tetraedrului și planurile de coordonate; O — axele de simetrie ale octaedrului; O_h — axele de simetrie ale octaedrului și planurile de coordonate.

Existența unor elemente de simetrie ce nu sînt indicate în simbol rezultă din teoremele asupra compunerii.

Sistemul de notații cristalografice, propus de A. V. Șubnikov, utilizat în multe cărți și reviste sovietice, are aceeași logică internă ca și sistemul internațional, deosebindu-se însă întrucîtva de ultimul prin notațiile sale. După Șubnikov, axele și planurile se notează la fel ca în sistemul internațional. Perpendicularitatea nu se notează prin linie de fracție, ci prin două puncte, iar paralelismul printr-un punct. Linia oblică, care separă două denumiri ale axelor, înseamnă că aceste axe formează între ele un unghi. În afară de aceasta, liniuța de deasupra simbolului axei înseamnă că această axă este axă de oglindire, spre deosebire de simbolul internațional, la care aceeași liniuță înseamnă o axă de inversie.

Prin urmare, simbolul $\bar{3}$ are, după Șubnikov, aceeași semnificație cu simbolul $\bar{6}$ din sistemul internațional și invers, simbolul $\bar{6}$ șubnikovian corespunde simbolului $\bar{3}$ internațional. Uneori, pentru a evita ambiguitățile, axa de oglindire din simbolistica Șubnikov se notează cu o tremă. Celelalte diferențe din simbolistica Șubnikov se pot lămuri din tabelul 6.1.

§ 6. DEDUCEREA ȘI DESCRIEREA CELOR 32 DE CLASE DE SIMETRIE ALE CRISTALELOR (CELOR 32 GRUPURI PUNCTUALE DE SIMETRIE)

Pentru a deduce cele 32 de clase de simetrie este necesar să reexaminăm toate combinațiile posibile ale elementelor de simetrie cristalografice, care se intersectează într-un punct. Pentru aceasta să luăm un element de simetrie generator, inițial, oarecare și să îi adăugăm pe rînd toate celelalte elemente de simetrie rămase, drept elemente de simetrie generatoare. Pe baza teoremelor din § 10, din combinațiile a două elemente de simetrie generatoare se deduc elementele de simetrie generate.

Să începem cu cristalele în care există direcții particulare, adică cu cele din categoriile inferioară și medie. Vom lua drept element de simetrie generator o axă de simetrie de-a lungul direcției particulare și vom adăuga la ea celelalte elemente de simetrie, așa cum se vede în figura 6.1. Planurile de simetrie pot trece fie după axa de simetrie aleasă, fie normal la ea, dat fiind că în orice altă configurație axa de simetrie, oglindindu-se în planul de sime-

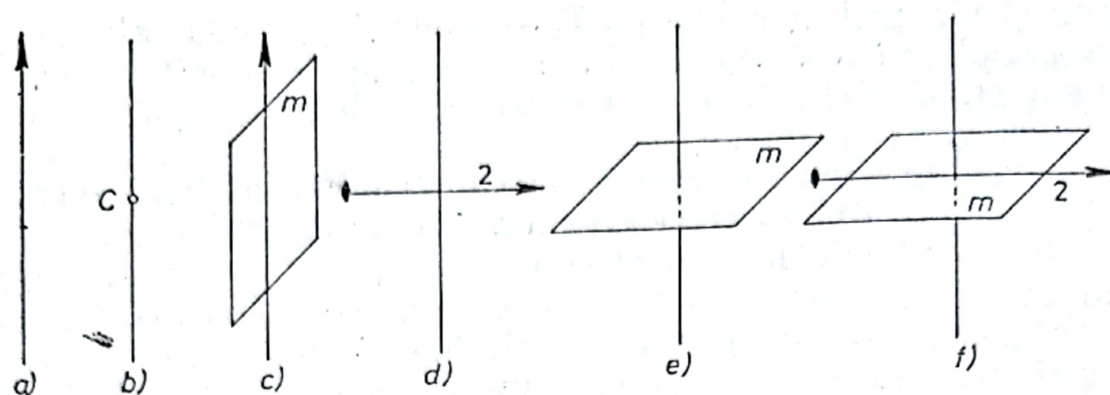


Fig. 6.1. Scheme pentru deducerea claselor de simetrie ale categoriilor inferioară și medie.

trie, se va repeta, adică nu va fi unică. Din aceeași cauză, axe 2 pot fi numai perpendiculare la axa aleasă; în categoriile inferioară și medie nu pot exista alte axe. Centrul de simetrie se poate găsi numai pe axa aleasă. Prin urmare, în cristalele de categorie inferioară sau medie nu pot exista alte combinații în afară de cele indicate în figura 6.1.

Clasele de simetrie *simple* sau *primitive* sînt acele clase în care există doar un singur element de simetrie și anume o axă de rotație de ordinul n, de-a lungul direcției particulare (fig. 6.1, *a*).

Adăugînd fiecăreia dintre axe un centru de simetrie și aplicînd teorema 3, obținem clasele centrate (fig. 6.1, *b*):

Axa generatoare	1	2	3	4	6
Elementul generat	—	m	—	m	m
Clasa de simetrie	1	$2/m$	$\bar{3}$	$4/m$	$6/m$.

Adăugarea centrului de simetrie la o axă 3 a convertit-o într-o axă de inversie, $\bar{3}$. Uneori, clasa $\bar{3}$ nu este considerată clasă centrală, ci o clasă primitivă de inversie (v. tabelele 6.1. și 6.2).

Adăugînd axei de simetrie generatoare planul de simetrie, care trece prin ea, obținem, pe baza teoremei 4, după schema $m \cdot n = nm$ *clasele planare* (fig. 6.1, *c*):

Axa generatoare	1	2	3	4	6
Clasa de simetrie	m	$mm2$	$3m$	$4mm$	$6mm$

Sensul scrierii simbolurilor $4mm$ și $6mm$ este explicat mai sus: pe locul al doilea se află elementele de simetrie de coordonate, iar pe locul al treilea cele diagonale. Clasa $mm2$ face parte din singonia rombică, în care, după regulile structurii cristalografice, axa 2 (dacă este unică) trebuie să fie o axă 2_z, ceea ce înseamnă că ea trebuie să fie scrisă pe locul al treilea în simbol.

Dacă se adaugă axa 2, perpendiculară pe axa generatoare, obținem, conform teoremei 1, *clasele axiale* (fig. 6.1, *d*) :

Axa generatoare	1	2	3	4	6
Clasa de simetrie	$\boxed{2}$	222	32	422	622

Clasa 2 este încadrată într-un chenar pentru a arăta că această combinație a fost deja dedusă mai sus. În simbolurile 422, 622, în poziția a doua se află axele 2, care sînt după direcțiile de coordonate, iar în poziția a treia — după direcțiile diagonale.

Adăugînd axei generatoare planul de simetrie perpendicular (fig. 6.1, *e*), obținem, conform teoremei 2a, clasele enumerate deja mai sus :

Axa generatoare	1	2	3	4	6
Clasa de simetrie	$\boxed{m}$	$\boxed{2/m}$	$\boxed{\bar{3}}$	$\boxed{4/m}$	$\boxed{6/m}$

Dacă axei de simetrie generatoare i se adaugă centrul, o axă 2 și un plan longitudinal, m, atunci vom obține, conform teoremelor 3 și 4, *clasele planaxiale* (fig. 6.1, *f*) :

Axa generatoare	1	2	3	4	6
Clasa de simetrie	$\boxed{2/m}$	mmm	$\bar{3}m$	$4/mmm$	$6/mmm$.

Clasele enumerate epuizează combinațiile elementelor de simetrie cu axă generatoare de simetrie de rotație.

Să ne referim acum la axele de simetrie de inversie. Axele $\bar{1}$, $\bar{2} \equiv m$, $\bar{3}$ și $\bar{6}$ au fost trecute deja în revistă. A rămas numai axa $\bar{4}$, care, ca și axele $\bar{3}$ și $\bar{6}$, dă axele primitive de inversie

$$\bar{3},\ \bar{4},\ \bar{6}.$$

Clasele planare de inversie

$$\bar{4}2m \text{ și } \bar{6}m2$$

se obțin dacă axei de inversie generatoare i se adaugă un plan de simetrie care trece de-a lungul axei.

Mai întîi vom observa că orice axă de simetrie de inversie de ordinul $2n$ este totodată și o axă de simetrie simplă de ordinul n. Prin urmare, conform teoremei 4, dacă printr-o axă $\overline{2n}$ trece un plan de simetrie, atunci trebuie să existe n asemenea planuri. Combinației de elemente de simetrie astfel apărute i se aplică o nouă teoremă (numărătoarea teoremelor o continuă pe cea din § 3).

T e o r e m a 6. Dacă după o axă de inversie pară, trec diferite planuri de simetrie, atunci între ele se vor dispune axele de simetrie de ordinul doi.

Tabelul 6.1

Cele 32 clase de simetrie, notațiile și denumirile

Nr. crt.	Simbolul internațional prescurtat	Simbolul internațional complet	Formula de simetrie	Simbolul Schoenflies	Simbolul Șubnikov	Denumirea după Institutul „Fiodorov"	Denumirea după Schoenflies	Denumirea după Groth
	Sistemul triclinic							
1	1		L_1	C_1	1	primitivă	hemiedrie	monoedrică
2	$\bar{1}$		C	$C_i = S_2$	$\bar{2}$	centrată	holoedrie	pinacoidală
	Sistemul monoclinic							
3	2		L_2	C_2	2	axială	hemiedrie	diedrică cu axe
4	m		P	$C_s = C_{1h}$	m	planară	hemimorfie	domatică
5	$2/m$	$\frac{2}{m}$	L_2PC	C_{2h}	$2 : m$	planaxială	holoedrie	prismatică
	Sistemul rombic							
6	222		$3L_2$	$D_2 = V$	$2 : 2$	primitivă	hemiedrie enantiomorfă	rombo-tetraedrică
7	mm	$2\ mm$, $mm2$	L_22P	C_{2v}	$2 \cdot m$	centrată	hemimorfie	rombo-piramidală
8	mmm	$\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$3L_23PC$	$D_{2h} = V_h$	$m \cdot 2 : m$	axială	holoedrie	rombo-dipiramidală
	Sistemul trigonal							
9	3		L_3	C_3	b	primitivă	tetartoedrie romboedrică	trigonalo-piramidală
10	$\bar{3}$		$L_3C = L_{3i}$	$C_{3i} = S_6$	$\bar{6}$	centrată	tetartoedrie hexagonală	romboedrică

Tabelul 6.1 (continuare)

11	32		$L_3 3L_2$	D_3	3 : 2	axială	hemiedrie enantiomorfă	trigonalo-trapezoedrică
12	3*m*		$L_3 3P$	C_{3v}	$3 \cdot m$	planară	hemiedrie hemimorfă	ditrigonalo-piramidală
13	$\bar{3}m$	$\bar{3}\,\frac{2}{m}$	$L_3 3L_2 3PC$	D_{3d}	$\bar{6} \cdot m$	planaxială	holoedrie romboedrică	ditrigonalo-scalenoedrică
				Sistemul hexagonal				
14	6		L_6	C_6	6	primitivă	tetartoedrie hexagonală	hexagonalo-piramidală
15	$\bar{6}$		$L_3 P$	C_{3h}	3 : *m*	primitivă de inversie	hemiedrie paramorfă trigonală	trigonalo-dipiramidală
16	6/*m*	$\frac{6}{m}$	$L_6 PC$	C_{6h}	6 : *m*	centrată	hemiedrie paramorfă	hexagonalo-dipiramidală
17	622		$L_6 6L_2$	D_6	6 : 2	axială	hemiedrie enantiomorfă	hexagonalo-trapezoedrică
18	6 *mm*		$L_6 6P$	C_{6v}	$6 \cdot m$	planară	hemiedrie hemimorfă	dihexagonalo-dipiramidală
19	$\bar{6}m2$		$L_3 3L_2 4P$	D_{3h}	$m \cdot 3 : m$	planară de inversie	holoedrie trigonală	ditrigonalo-dipiramidală

Tabelul 6.1 (continuare)

Nr. crt.	Simbolul internațional		Formula de simetrie	Simbolul Schoenflies	Simbolul Șubnikov	Denumirea		
	prescurtat	complet				după Institutul „Fiodorov"	după Schoenflies	după Groth
20	$6/mmm$	$\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$L_6 6L_2 7PC$	D_{6h}	$m \cdot 6 : m$	planaxială	holoedrie	dihexagonalo-dipiramidală
				Sistemul tetragonal				
21	4		L_4	C_4	4	primitivă	tetartoedrie	tetragonalo-dipiramidală
22	$\bar{4}$		$L_{\bar{4}}$, L_{4i}	$S_{\bar{4}}$	$\bar{4}$	primitivă de inversie	tetartoedrie de specia a doua	tetragonalo-tetraedrică
23	$4/m$	$\frac{4}{m}$	L_4PC	C_{4h}	$4 : m$	centrată	hemiedrie paramorfă	tetragonalo-dipiramidală
24	422		$L_4 4L_2$	D_4	$4 : 2$	axială	hemiedrie enantiomorfă	tetragonalo-trapezoedrică
25	$4mm$		$L_4 4P$	C_{4v}	$4 \cdot m$	planară	hemiedrie hemimorfă	ditetragonalo-piramidală
26	$\bar{4}2m$		$L_4 2L_2 2P$	$D_{2d} = V_d$	$\bar{4} \cdot m$	planară de inversie	hemiedrie de specia a doua	tetragonalo-scalenoedrică
27	$4/mmm$	$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$L_4 4L_2 5PC$	D_{4h}	$m \cdot 4 : m$	planaxială	holoedrie	ditetragonalo-dipiramidală

Sistemul cubic

28	23	$3L_2 4L_3$	T_d	3/2	primitivă	tetartoedrie paramorfă	tritetraedrică
29	$m3$ | $\frac{2}{m}\bar{3}$	$3L_2 4L_3 3PC$	T_h	$\bar{6}/2$	centrată	hemiedrie	didodecaedrică
30	432	$3L_4 4L_3 6L_2$	O	$\bar{3}/4$	axială	hemiedrie enantiomorfă	trioctaedrică
31	$\bar{4}3m$	$3L_4 4L_3 6P$	T_d	$3/\bar{4}$	planară	hemiedrie hemimorfă	hexatetraedrică
32	$m3m$ | $\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	$3L_4 4L_3 6L_2$ $9PC$	O_h	$\bar{6}/4$	planaxială	holoedrie	hexoctaedrică

În ceea ce privește denumirile claselor de simetrie, v. și Codarcea (1965, p. 148).

Tabelul 6.2

Complexele elementelor de simetrie ale celor 32 de clase

Categoria	Sistemele	Clasele						
		Primitive	Primitive de inversie	Centrate	Axiale	Planare	Planare de inversie	Planaxiale
Categoria inferioară	Triclinic	1		$\bar{1}$				
	Monoclinic				2	m		2/m
	Rombic				222	m2		mmm

Tabelul 6.2. (continuare)

	Sistemele	Clasele						
		Primitive	Primitive de inversie	Centrate	Axiale	Planare	Planare de inversie	Planaxiale
Categoria medie	Trigonal	3		$\bar{3}$	32	3m		$\bar{3}m$
	Hexagonal	6	$\bar{6}$	6/m	622	6mm	$\bar{6}m2$	6/mmm
	Tetragonal	4	$\bar{4}$	4/m	422	4mm	$\bar{4}2m$	4/mmm
Categoria superioară	Cubic	23		m3	32	$\bar{4}3m$		m3m

Să ilustrăm această teoremă în figura 6.2 pentru axa $\bar{4}$. Fiind dat planul I, aceasta înseamnă că inevitabil apare şi un plan II. Cu ajutorul axei $\bar{4}$, transpunem triunghiul A, trecînd prin poziţia A', în poziţia B, iar cu ajutorul planului II, din B în C. Însă C s-ar fi putut obţine din A şi printr-o simplă rotaţie în jurul unei axe 2, luată după bisectoarea unghiului dintre planurile I şi II.

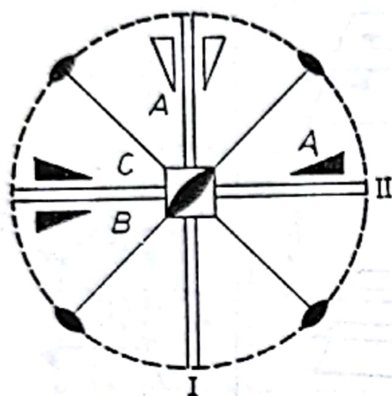


Fig. 6.2. Schemă pentru deducerea clasei de simetrie $\bar{4}2m$.

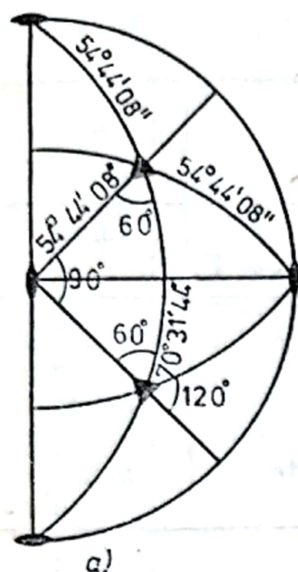
Astfel, axa $\bar{4}$ şi planul longitudinal de simetrie, m, generează un al doilea plan m longitudinal şi două axe 2 transversale, după bisectoarele unghiurilor dintre planuri. Combinaţia completă a elementelor de simetrie are forma $\bar{4}2m$.

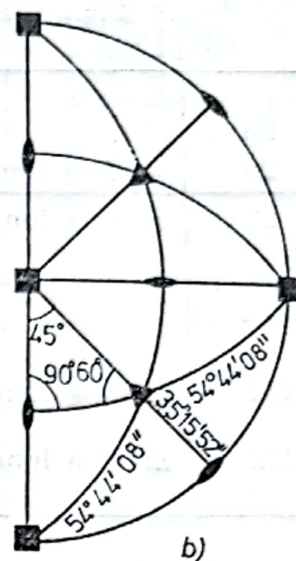
Analog, axa de inversie $\bar{6}$ şi un plan m, care trece prin ea, generează încă două planuri m longitudinale şi trei axe 2 transversale, adică se obţine combinaţia $\bar{6}m2$.

Adăugarea pe rînd la axele de simetrie de inversie a planurilor perpendiculare, a axelor 2 şi a centrului de inversie nu conduce la nici un fel de combinaţii noi. Prin urmare, pentru categoriile inferioară şi medie se obţin 27 clase de simetrie (v. tab. 6.1).

Să trecem acum la categoria superioară. În cristalele din categoria superioară nu există direcţii particulare şi pot exista cîteva axe de simetrie de ordin mai mare ca 2, care se intersectează într-un singur punct. În § 3 (p. 48) s-a arătat că în acest caz sînt posibile numai două combinaţii stabile de axe de simetrie: 4, 3, 2 şi 3, 3, 2, care corespund axelor de simetrie ale octaedrului (sau cubului) şi axelor de simetrie ale tetraedrului (fig. 6.3). Corespunzător, obţinem două clase de simetrie ale singoniei cubice: clasa primitivă 23 (axele de simetrie ale tetraedrului) şi clasa axială 432 (axele de simetrie ale octaedrului sau cubului).

Celelalte clase din singonia cubică pot fi deduse în acelaşi mod în care s-a procedat pentru categoriile inferioară şi medie, adică adăugînd succesiv cîte un centru de simetrie sau cîte un





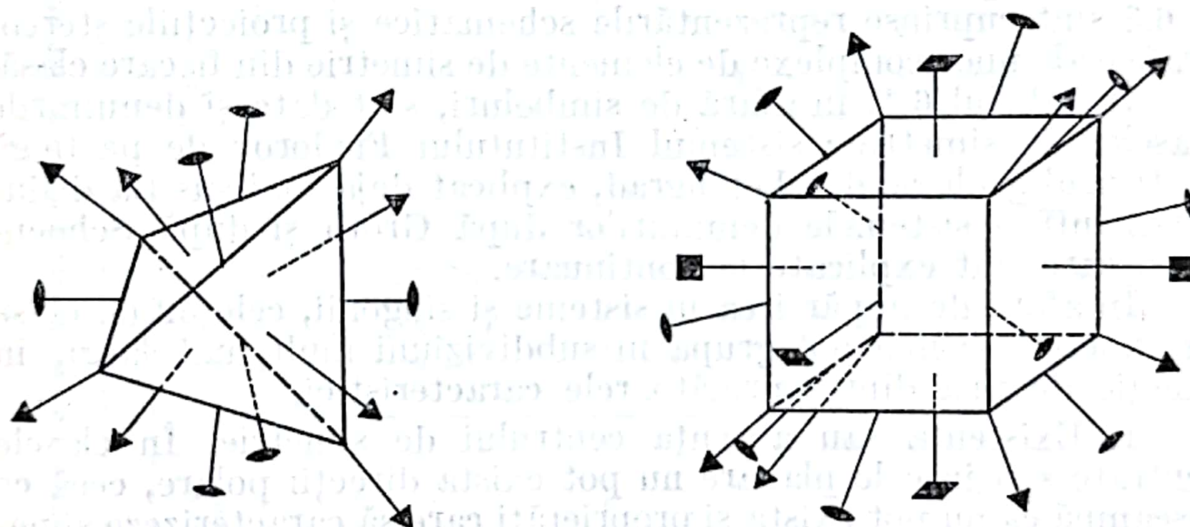


Fig. 6.3. Combinațiile posibile de axe de simetrie în cristalele categoriei superioare: 23 (*a*) și 432 (*b*).

plan de simetrie. Axa 2 nu poate fi adăugată aici, deoarece toate combinațiile de axe posibile sînt epuizate.

Planurile pot fi adăugate numai în două feluri: trei planuri de coordonate sau șase planuri diagonale. O altă aranjare a planurilor este imposibilă, dat fiind că la intersecțiile planurilor ar apărea noi axe. Planurile normale la axele pare vor da centrul de simetrie (teorema 2).

Vom ordona toate combinațiile în tabelul de la p. 72.

Astfel, în final obținem, pentru sistemul cubic, cinci clase de simetrie:

$$23,\ m3,\ 432,\ \bar{4}3m,\ m3m.$$

Generatoare		Generate	Rezultatul
23	$\bar{1}$	Trei planuri coordonate	$m3$
23	m de-a lungul axei 2	$\bar{1}$	$m3$
23	m de-a lungul axei 3	Şase planuri diagonale Axa 2 se transformă în axă $\bar{4}$	$\bar{4}3m$
432	$\bar{1}$	Trei planuri de coordonate Şase planuri diagonale	$m3m$
432	m de-a lungul axei 4	Centru de simetrie Şase planuri diagonale	$m3m$
432	m de-a lungul axei 3	Trei planuri de coordonate Centru de simetrie	$m3m$

Sinteza completă a celor 32 de clase de simetrie şi repartizarea lor după sisteme este dată în tabelul 6.1, iar în tabelele 6.2 şi 6.3 sînt cuprinse reprezentările schematice şi proiecţiile stereografice ale unor complexe de elemente de simetrie din fiecare clasă.

În tabelul 6.1, în afară de simboluri, sînt date şi denumirile claselor de simetrie : sistemul Institutului Fiodorov de pe lîngă Institutul geologic din Leningrad, explicat deja mai sus (la deducerea lui) şi sistemele denumirilor după Groth şi după Schoenflies, care sînt explicate în continuare.

În afară de împărţirea în sisteme şi singonii, cele 32 de clase de simetrie se mai pot grupa în subdiviziuni mult mai largi, în funcţie de una dintre următoarele caracteristici.

1. Existenţa sau absenţa centrului de simetrie. În clasele centrate sau în cele planare nu pot exista direcţii polare, ceea ce înseamnă că nu pot exista şi proprietăţi care să caracterizeze simetria polară ; celelalte clase sînt clase necentrate.

2. Enantiomorfismul. Cristalele care fac parte din clasele care au numai axe de simetrie de rotaţie, dar în care nu există axe de inversie, planuri transversale şi centru de simetrie, se pot prezenta sub două variante : drepte sau stîngi. În ele sînt posibile forme drepte sau stîngi (v. fig. 3.9) cît şi astfel de proprietăţi cum ar fi rotirea planului de polarizare (rotirea planului de polarizare este posibilă numai în cristalele enantiomorfe — v. § 81). Enantiomorfe sînt clasele primitive şi axiale.

3. Clasele de simetrie Laue sau subsistemele. Conform legii Friedel sau legii conform căreia efectul de difracţie este centrosimetric datorită simetriei reflexiei radiaţiilor Röntgen, simetria de difracţie a cristalului este superioară faţă de simetria lui punctuală. Ea corespunde grupului punctual plus un centru de inversie şi plus elemente de simetrie generate datorită adăugării

Tabelul 6.3

Proiecțiile stereografice ale complexelor elementelor de simetrie ale celor 32 de clase

Categoria	Sistemele	Clasele: Primitive	Primitive de inversie	Centrate	Axiale	Planare	Planare de inversie	Planaxiale
Categoria inferioară	Triclinic	1		$\bar{1}$				
	Monoclinic				2	m		2/m
	Rombic				222	mm		mm2

Tabelul 6.3 (continuare)

	Sistemele	Clasele						
		Primitive	Primitive de inversie	Centrate	Axiale	Planare	Planare de inversie	Planaxiale
Categoria medie	Trigonal	3		$\bar{3}$	32	3m		$\bar{3}m$
	Hexagonal	6	$\bar{6}$	6/m	622	6mm	$\bar{6}m2$	6/mmm
	Tetragonal	4	$\bar{4}$	4/m	422	4mm	$\bar{4}2m$	4/mmm
Categoria superioară	Cubic	23		m3	432	$\bar{4}3m$		m3m

Tabelul 6.4

Împărțirea substanțelor studiate în cele 32 de clase (Nowacki, 1967)

	Numărul absolut de substanțe			În procente *		
	anorganice	organice	total	anorganice	organice	total
1	6	35	41	—	1	0,5
$\bar{1}$	97	152	249	2	5	3
2	42	325	367	1	10	4
m	32	38	70	1	1	1
2/*m*	705	1203	1908	13	37	22
222	86	510	596	1,5	16	7
*mm*2	99	127	226	2	4	3
mmm	835	323	1158	15	10	13
4	5	12	17	—	—	—
$\bar{4}$	30	17	47	0,5	0,5	0,5
4/*m*	97	38	135	2	1	1,5
422	25	43	68	0,5	1	1
4*mm*	8	6	14	—	—	—
$\bar{4}2m$	78	29	107	1	1	1
4/*mmm*	520	59	579	9	2	7
3	12	13	25	—	—	—
$\bar{3}$	114	38	152	2	1	2
32	62	10	72	1	—	1
3*m*	69	37	103	1	1	1
$\bar{3}m$	415	29	444	7,5	1	5
6	9	9	18	—	—	—
$\bar{6}$	1	—	1	—	—	—
6/*m*	82	15	97	1,5	0,5	1
622	38	14	52	1	—	1
6*mm*	74	6	80	1	—	1
$\bar{6}m2$	38	4	42	1	—	0,5
6/*mmm*	347	8	355	6	—	4
23	23	72	15	1	0,5	1
*m*3	197	15	212	3,5	0,5	2
432	12	9	21	—	—	—
$\bar{4}3m$	203	16	219	4	0,5	2,5
*m*3*m*	1162	62	1223	21	2	14

* Semnul „—" înseamnă < 0,5%

centrului de inversie. Subsistemele sînt date în tabelul 7.1; în categoria inferioară ele coincid cu înseși sistemele, în categoriile medie și superioară fiecare sistem se subdivide în două subsisteme: superior și inferior. În fiecare subsistem intră o clasă centrosimetrică și una enantiomorfă; este posibilă existența în ele și a altor clase, nefiind însă obligatorie. Subsistemele se numesc, de asemenea, *clase Laue*, fiind notate cu simbolurile care intră în clasele lor centrosimetrice.

Împărţirea claselor în 7 sisteme şi 32 clase este foarte neuniformă (tab. 6.4). Dintre cele două mii de substanţe cristaline naturale şi sintetizate artificial a căror structură este cunoscută, mai mult de jumătate revine cristalelor din categoria inferioară, dacă le luăm după denumiri (Nowacki, 1967). Cu totul altă situaţie se obţine dacă judecăm după răspîndirea substanţelor în stare cristalină şi după valoarea lor practică.

Aproape toate metalele şi aliajele lor cristalizează în clasa $m3m$ din singonia cubică, sau $6/mmm$ din singonia hexagonală. Semiconductorii elementari — germaniul, siliciul, staniul cenuşiu şi diamantul — cristalizează în clasa $m3m$ din singonia cubică (structură de tipul diamantului). Celelalte cristale semiconductoare aparţin în marea lor majoritate clasei $\bar{4}3m$ din singonia cubică (structură de tip sfalerit) şi clasei $\bar{6}m2$ din singonia hexagonală (structură de tip wurtzit).

Printre cele 32 de clase există clase bogat reprezentate. Din clasa $2/m$ fac parte aproape două mii de substanţe, ca gipsul, feldspaturile, micile, naftalenul, antracenul, triglicinsulfatul etc. Foarte bogată este şi clasa $mm2$, care numără mai bine de o mie de reprezentanţi. Aproape că nu există substanţe care să cristalizeze în clasele 4, 3, 6, 432.

§ 7. GRUPURI DE SIMETRIE LIMITĂ (GRUPURI CURIE)

Mai sus (§ 1) s-a remarcat dualitatea căilor de analiză a cristalelor şi a proprietăţilor lor fizice. În cadrul studiului geometriei structurii şi al proprietăţilor ce depind de defectele de structură, cristalele trebuie considerate ca medii discrete, pe cînd pentru tratarea unei întegi serii de proprietăţi fizice (termice, electrice, optice, elastice etc.), cristalul poate fi considerat ca un mediu continuu, omogen. În grupurile de simetrie a cristalului ca mediu continuu, compact intră numai axele de ordin 2, 3, 4, 6, pe cînd în grupurile de simetrie a proprietăţilor unui astfel de mediu pot intra şi axe de simetrie de ordin infinit, pe care le vom nota cu semnul ∞. În afară de aceasta, axele pot intra şi în grupurile de simetrie a cîmpurilor fizice : electric, magnetic, cîmpul tensiunilor mecanice.

Grupurile punctuale de simetrie în care intră axe de simetrie de ordin infinit se numesc *grupuri de simetrie limită* sau *grupuri Curie.* Există şapte asemenea grupuri, iar fiecare dintre cele 32 grupuri punctuale de simetrie ale cristalelor reprezintă un subgrup al cel puţin uneia dintre grupurile punctuale limită, fiind

Tabelul 7.1

Clasele cristalografice și clasele limită
(notațiile internaționale și notațiile Schoenflies)

Subsistemul		inferior			superior			
Categoria	Clasa / Sistemul	primitivă	primitivă de inversie	centrată	axială	planară	planară de inversie	planaxială
inferioară	triclinic	1 C_1		$\bar{1}$ C_i				
	monoclinic				2 C_2	m C_{1h}		$2/m$ C_{2h}
	rombic				222 $D_2 = V$	mm^2 C_{2v}		mmm $D_{2h} = V_h$
medie	trigonal	3 C_3		$\bar{3}$ $C_{3i} = S_6$	32 D_3	$3m$ C_{3v}		$\bar{3}m$ D_{3v}
	tetragonal	4 C_4	$\bar{4}$ S_4	$4/m$ C_{4h}	422 D_4	$4mm$ C_{4v}	$\bar{4}2m$ $D_{2d} = V_d$	$4/mmm$ D_{4h}
	hexagonal	6 C_6	6 C_{3h}	$6/m$ C_{6h}	622 D_6	$6mm$ C_{6v}	$\bar{6}m2$ D_{3h}	$6/mmm$ D_{6h}
superioară	cubic	23 T		$m3$ T_h	432 O	$\bar{4}3m$ T_d		$m3m$ O_h
Grupuri Curie	texturi	∞ C_∞		∞/m $C_{\infty h}$	$\infty 2$ D_∞	∞m $C_{\infty v}$		∞/mm $D_{\infty h}$
	corpuri izotrope				$\infty\infty$ R			$\infty\infty/m$ R_i

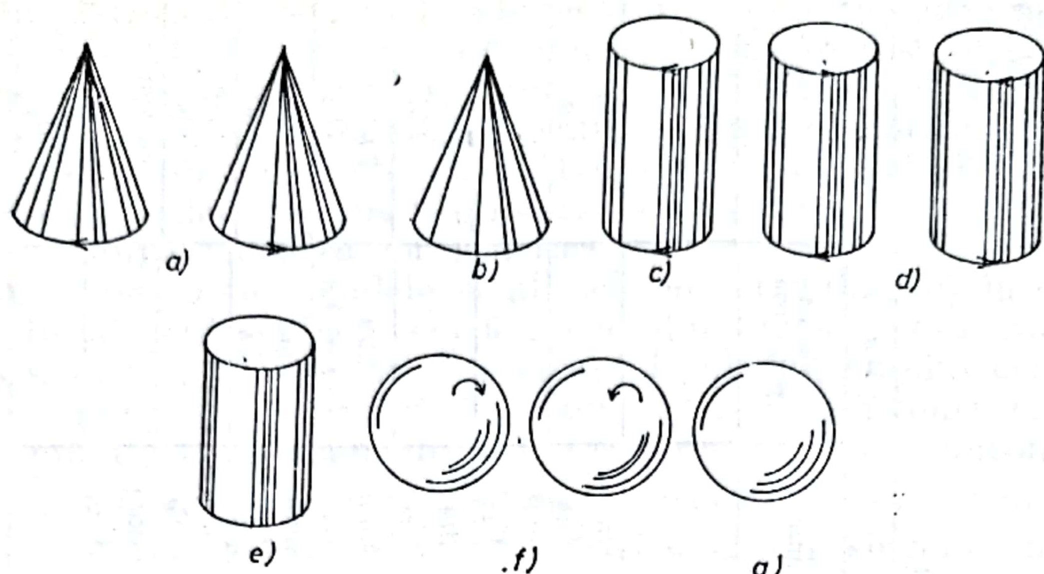


Fig. 7.1. Figuri geometrice care ilustrează grupurile de simetrie punctuale limită : ∞, drept și stîng (*a*) ; ∞m (*b*) ; ∞/m (*c*) ; $\infty 2$, drept și stîng (*d*) ; ∞/mm (*e*) ; $\infty\infty$, drept și stîng (*f*) ; $\infty\infty m$ (*g*).

subordonat aceluia dintre ele, care, față de acest subgrup constituie subgrupul limită cel mai apropiat (tab. 7.1). Astfel, de exemplu, grupul limită de simetrie, caracterizat printr-o singură axă de simetrie de ordin infinit, ∞, conține subgrupurile cristalografice 6, 4, 3, 2, 1, acestea fiindu-i subordonate anume lui, deși și toate celelalte grupuri limită sînt tot subgrupuri ale lui. Figura geometrică corespunzătoare grupului punctual ∞ este un con care se rotește : el se suprapune cu sine prin rotirea cu orice unghi în jurul axei de simetrie, nemaiavînd însă nici un alt element de simetrie (fig. 7.1).

Același con, care însă nu se rotește, se caracterizează prin grupul punctual ∞m, adică printr-o singură axă de simetrie de ordin infinit și un număr infinit de planuri de simetrie de-a lungul axei de simetrie. Axa de simetrie din con este polară. O astfel de simetrie prezintă, de pildă, cîmpul electric omogen : axa de simetrie coincide la acesta cu direcția liniilor de cîmp.

Simetria cîmpului magnetic omogen este exprimată de grupul limită ∞/m, adică de o singură axă de simetrie infinită și planul de simetrie perpendicular pe ea. O figură caracteristică pentru grupul ∞/m este un cilindru în rotație. Grupului ∞/m îi sînt subordonate grupurile $6/m$, $4/m$, $2/m$, m, $\bar{6}$, $\bar{4}$, $\bar{3}$, $\bar{1}$; afară de subgrupurile enumerate, tot subgrupuri cristalografice ale grupului ∞/m sînt și grupurile subordonate grupului limită ∞.

În figura 7.1 sînt reprezentate figurile geometrice finite cu ajutorul cărora pot fi caracterizate grupurile simetriei limită. Un cilindru în repaus precum și un cilindru întins sau comprimat se caracterizează prin simetria ∞/mm, adică printr-o axă nepolară,

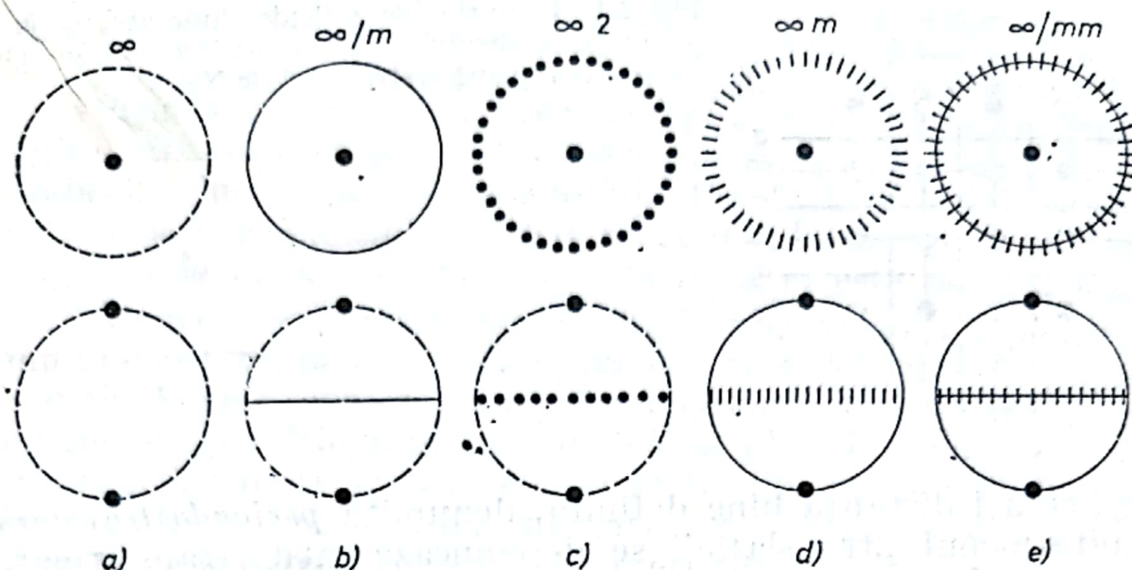


Fig. 7.2. Notațiile convenționale ale elementelor de simetrie ale celor cinci grupuri limită Curie, în proiecții stereografice : ∞ (*a*), ∞/*m* (*b*), ∞2 (*c*), ∞(*m*) (*d*), ∞/*mm* (*e*). Rîndul de sus : axa ∞ este perpendiculară la planul desenului ; rîndul de jos : axa ∞ se află în planul desenului.

∞, un număr infinit de planuri longitudinale, *m*, un plan *m* transversal, un număr infinit de axe transversale 2 și un centru de simetrie. Un cilindru torsionat după axa geometrică are o simetrie ∞2, adică o axă nepolară ∞ și un număr infinit de axe transversale, 2. O sferă obișnuită se caracterizează prin grupul ∞∞*m*, adică printr-un număr infinit de axe ∞ și printr-un număr infinit de planuri. Acest grup se numește *grup ortogonal*.

Figura aparte ce ar corespunde grupului punctual limită ∞∞, ar putea fi imaginată ca o sferă la care toate razele se rotesc : există un număr infinit de axe ∞, neexistînd însă planuri de simetrie. Grupul ∞∞ se numește *grupul rotațiilor*.

Grupurile limită ∞, ∞2, ∞∞ sînt enantiomorfe, adică figurile unei asemenea simetrii pot fi drepte sau stîngi. Grupurile subordonate lor sînt tot enantiomorfe.

Notațiile convenționale ale elementelor de simetrie ale grupurilor limită, în proiecțiile stereografice, sînt date în figura 7.2.

§ 8. SIMETRIA STRUCTURII CRISTALELOR

În structura cristalelor, la transformările de simetrie finite, care intră în grupul punctual de simetrie, se adaugă și transformările de simetrie infinite.

Transformarea simetrică infinită fundamentală este *translația*, adică o deplasare care se repetă la infinit de-a lungul unei drepte,

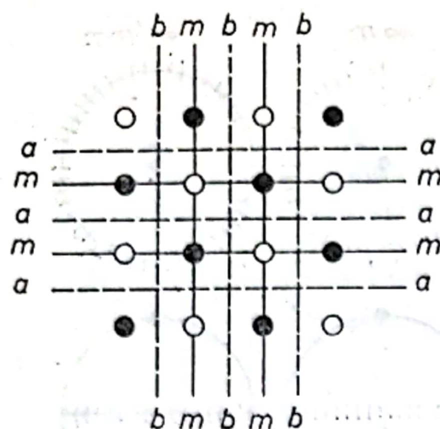


Fig. 8.1. Planurile de reflexie-alunecare, *a*, *b*, și planurile de simetrie de oglindire, *m* dintr-o rețea plană a structurii de NaCl.

cu o aceeași distanță bine definită, denumită *perioada translației* (prin termenul „translație'' se desemnează atît transformarea simetrică, elementul de simetrie, cît și, uneori, chiar perioada translației). Produsul dintre translație și operația de oglindire față de planul de simetrie dă naștere unei operații de simetrie complicată, infinită — transformarea cu ajutorul planului de reflexie cu alunecare. *Planul de reflexie cu alunecare* este ansamblul format din aplicarea simultană a planului de simetrie și a unei deplasări paralele cu aceasta, pe o distanță egală cu jumătate din perioada translației din plan. Acțiunea unui plan de reflexie cu alunecare poate fi ilustrată luînd ca exemplu sarea gemă (fig. 8.1 — a se compara cu fig. 1.2). În desen este figurată o singură rețea plană avînd o structură de acest fel : ionii de Na și de Cl alternează ca pătrățelele unei table de șah. Pentru ca un ion să poată fi suprapus peste un ion de același fel, cel mai apropiat, trebuie ca reflectarea pe planul de simetrie *a* sau *b* să se facă simultan cu o deplasare corespunzătoare de *a*/2 sau *b*/2 în plan. Într-o astfel de re-

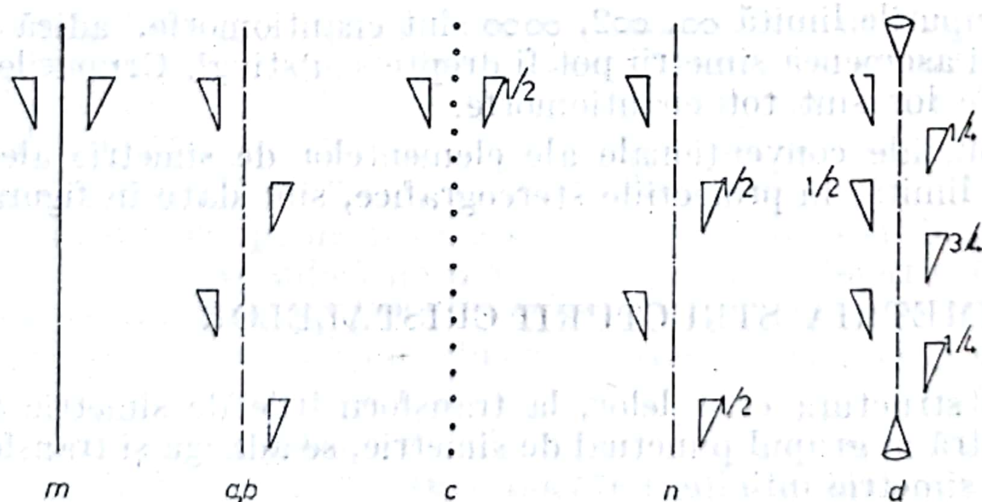


Fig. 8.2. Planul de reflexie-oglindire, *m*, și planurile de reflexie-alunecare, *a*, *b*, *c*, *n*, *d*.

flexie însoțită și de deplasare, se va suprapune cu ea însăși întreaga configurație a desenului plan infinit extins : $t_{a/2} \cdot m_a = a$; $t_{b/2} \cdot m_a = b$.

Prin centrele ionilor trec aici planuri de simetrie *m*, obișnuite, care alternează cu planurile de reflexie cu alunecare. Numărul ambelor feluri de planuri este infinit. Planurile de reflexie cu alunecare se notează cu simbolurile *a*, *b*, *c*, dacă alunecarea este orientată după axele *a*, *b*, *c* (*XYZ*), iar mărimea ei este de $a/2$, $b/2$, $c/2$.

Alunecarea poate fi orientată și după diagonala paralelogramului construit pe translațiile elementare *a*, *b*, *c*, din planul de alunecare. Anume, dacă deplasarea se face cu o jumătate din lungimea diagonalei paralelogramului, $(a + b)/2$, planul se notează cu simbolul *n*, iar dacă se face cu un sfert din lungimea diagonalei, $(a + b)/4$, cu simbolul *d*; planurile *d* se numesc de tipul diamantului, deoarece ele sînt caracteristice structurii diamantului. Planurile de reflexie cu alunecare sînt reprezentate prin linii întrerupte de diferite tipuri (fig. 8.2). În cadrul reflexiei pe un plan de reflexie cu alunecare, figura se deplasează cu o jumătate din perioada translației *c* a axei perpendiculare pe planul desenului. Pentru a indica faptul că figura simbol se află acum la o înălțime egală cu $c/2$ deasupra planului desenului, lîngă ea se notează numărul „1/2". Analog, numerele 1/4 sau 1/3 arată că figura simbol este plasată cu $c/4$ sau $c/3$ deasupra desenului. Transformarea simetrică prin intermediul planului de reflexie cu alunecare poate fi descrisă indicînd modul în care se modifică în cadrul ei coordonatele oricărui punct, *x*, *y*, *z*, luat arbitrar.

Produsul dintre o translație și o rotire în jurul unei axe de simetrie dă naștere rotației elicoidale. Se numește ***axă de simetrie elicoidală*** ansamblul format dintr-o axă de simetrie și translația după această axă, aplicate simultan. După efectuarea unei rotații complete, punctul inițial trebuie să se suprapună cu un alt punct absolut identic cu acesta, adică aflîndu-se la o depărtare de el egală cu o singură perioadă sau cu cîteva perioade de translație. Axele de simetrie elicoidale caracterizează, de exemplu, frunzele de arțar pe o ramură, boabele în spic, solzii conului de brad. Șurubul cu cap rotund are o axă de simetrie elicoidală de ordin infinit, iar în cazul în care capul șurubului este hexagonal, axa elicoidală este de ordinul șase. În spațiul cristalin axele de simetrie elicoidale pot fi numai de ordinele 2, 3, 4 și 6 (fig. 8.3). O axă elicoidală se notează cu o cifră, indexată tot cu cifre ; cifra arată, ca de obicei, ordinul axei, iar cîtul dintre indice și ordinul axei dă mărimea deplasării (translației) de-a lungul axei, în fracțiuni de translație elementară, după această axă.

Se deosebesc axe elicoidale stîngi și drepte. În tabelul 8.1 sînt reunite notațiile convenționale din sistemul internațional ale tuturor axelor elicoidale și ale planurilor de reflexie cu alunecare.

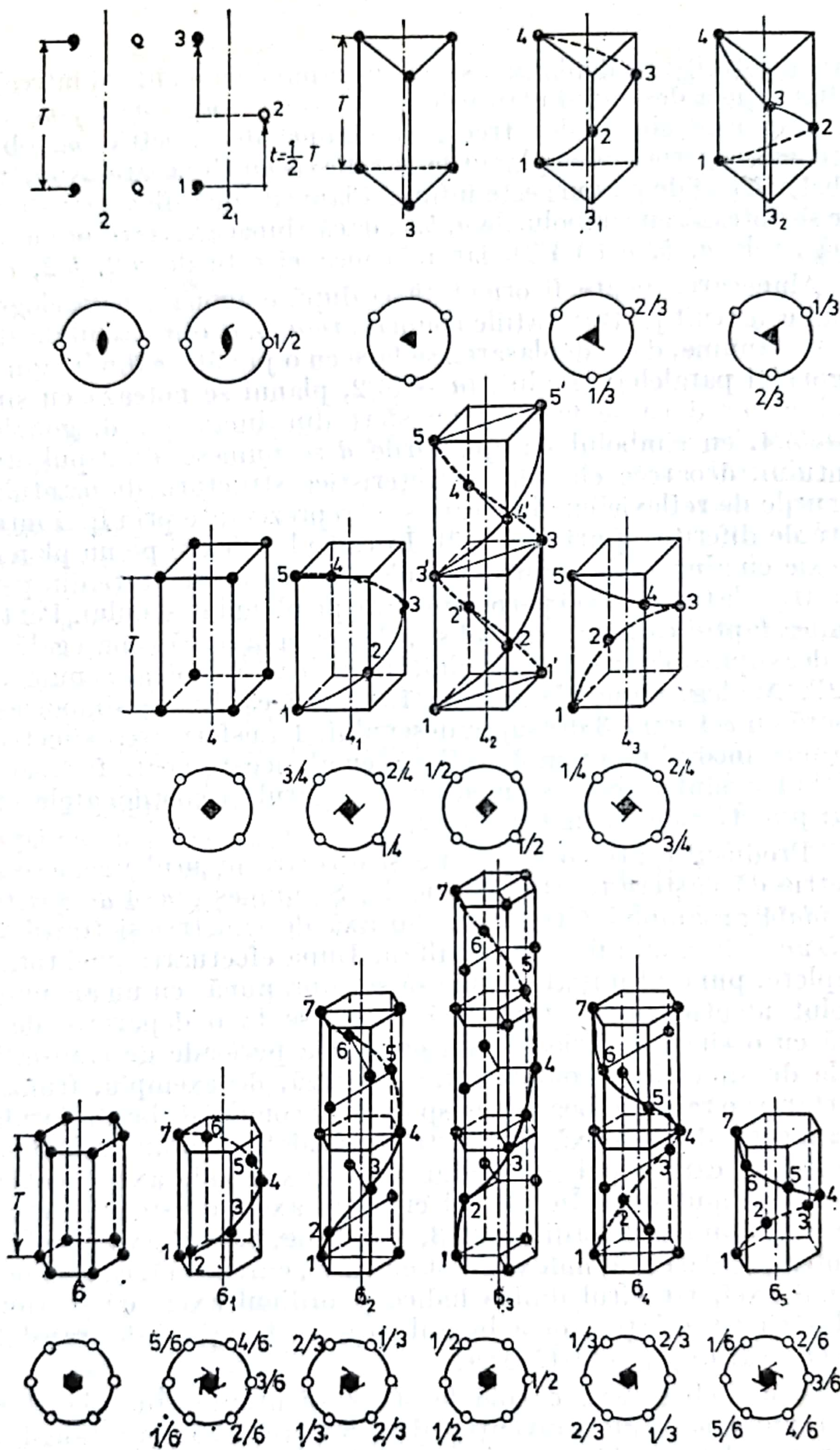


Fig. 8.3. Axe de simetrie elicoidale.

În notaţia Şubnikov axele elicoidale se notează cu un punct deasupra denumirii axei; axa elicoidală dreaptă se ia cu semnul plus, cea stîngă, cu semnul minus.

Tabelul 8.1

Notaţiile convenţionale ale elementelor de simetrie ale structurii cristalelor

Axe			Planuri		
verticale	orizontale	înclinate	verticale	orizontale	înclinate
2, 2_1, 3, 3_1, 3_2, 4, 4_1, 4_2, 4_3, 6, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5, $\bar{1}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$	2, 2_1, 4, 4_1, 4_2, 4_3, $\bar{4}$	2, 2_1, 3, 3_1, 3_2	m, a,b, c, n, d	m, a, b, n, d	m, a,b', n,d

Dăm notaţiile după Şubnikov (rîndul al doilea) în comparaţie cu simbolurile internaţionale (primul rînd) pentru axele elicoidale drepte:

2_1	3_1	3_2	4_1	4_3	6_1	6_5	6_3	6_4	6_2	4_2
$\pm\dot{2}$	$+\dot{3}$	$-\dot{3}$	$+\dot{4}$	$-\dot{4}$	$+\dot{6}$	$-\dot{6}$	$\dot{2}.3$	$+\dot{3}.2$	$-\dot{3}.2$	$\pm\dot{4}.2$

§ 9. COMBINAŢIILE ELEMENTELOR DE SIMETRIE ALE STRUCTURILOR. REŢELELE BRAVAIS. GENERAREA UNOR NOI ELEMENTE DE SIMETRIE

Transformarea simetrică fundamentală a structurilor cristaline este repetarea infinită; nici un singur punct nu rămîne pe loc, toate repetîndu-se la infinit prin translaţie. O structură cristalină constă din particule sau grupuri de particule legate între ele prin diferite transformări de simetrie. Combinarea translaţiilor cu fiecare dintre elementele de simetrie generează noi elemente de simetrie, care se repetă la infinit în spaţiu.

Pentru fiecare structură este caracteristic setul său de translaţii elementare sau grupul translaţiilor, care defineşte reţeaua spaţială.

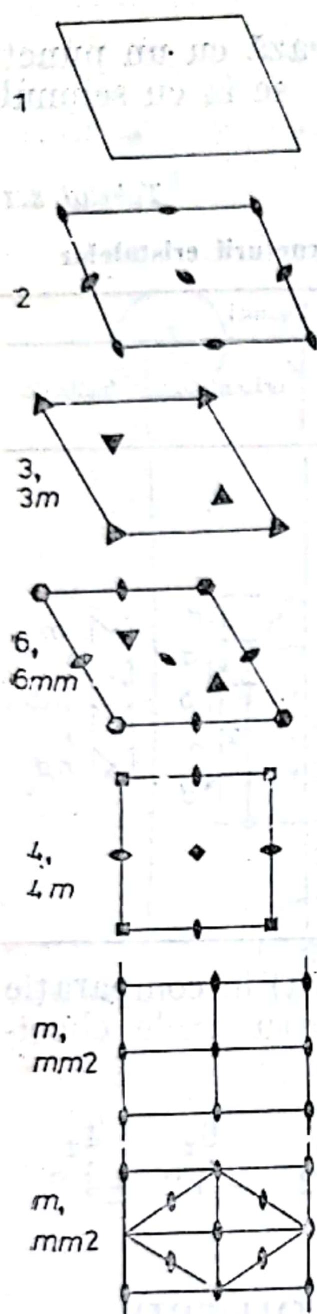


Fig. 9.1. Combinaţiile elementelor de simetrie care corespund grupurilor de simetrie punctuale ale sistemelor plane.

În funcţie de raportul dintre mărimi şi de orientările reciproce ale celor trei translaţii elementare, *a*, *b*, *c*, se obţin reţele diferite, care se deosebesc una de alta prin simetria lor. Simetria limitează numărul de reţele posibile. Toate structurile cristaline sînt descrise prin 14 grupuri de translaţie, care corespund celor 14 reţele Bravais. Se numeşte *reţea Bravais* un sistem infinit de puncte, care se obţine din repetarea prin translaţie a unui singur punct.

Cele 14 reţele Bravais se deosebesc între ele prin forma celulelor elementare şi în funcţie de simetria lor, fiind subîmpărţite în şase singonii. Subîmpărţirea în singonii s-a făcut încă de la începutul secolului al XIX-lea, numai pe baza examinării formei exterioare a mineralelor. Rezolvînd problema distribuţiei simetrice a unor particule sferice (a punctelor materiale) în spaţiu, în anul 1848 Bravais a ajuns la aceeaşi subîmpărţire în singonii.

Simetria spaţiului cristalin limitează numărul de reţele posibile. Reţeaua trebuie să fie invariantă în raport cu toate transformările de simetrie posibile pentru un spaţiu cristalin dat.

Principiul deducerii reţelelor Bravais va fi examinat luînd ca exemplu reţelele bidimensionale. O reţea plană este definită de o pereche de vectori ai bazei, a_1, a_2; parametrii celulei sînt a, b, γ. Cu reţeaua plană trebuie să fie compatibile rotaţiile în jurul axelor 1, 2, 3, 4, 6, perpendiculare la planul reţelei, reflexiile pe planurile de simetrie, de asemenea perpendiculare la planul reţelei; sînt incompatibile cu ea orice transformări de simetrie care ar scoate reţeaua din planul său.

Dintre cele 32 de grupuri de simetrie punctuale, sistemelor plane le sînt adecvate numai 10 grupuri punctuale (fig. 9.1) : 1, 2, 3, 4, 6, *m*, *mm*2, 3*m*, 4*mm*, 6*mm*. Numai aceste combinaţii ale elementelor de simetrie lasă punctul într-un plan dat. În toate grupurile punctuale bidimensionale, axa principală de simetrie este perpendiculară pe planul considerat, planurile de simetrie trecînd prin această axă. În grupul *m* se poate considera formal că planul *m* este după axa 1, normală la planul considerat.

Care sînt valorile posibile ale translaţiilor a, b, şi ale unghiului dintre ele, γ, în reţelele plane? În cazul general, $a \neq b$, $\gamma \neq 90°$, obţinem o reţea scalenă, cu laturile celulei inegale. Cu ea sînt compatibile rotaţiile în jurul axelor 1 şi 2. Existenţa axei 4 impune ca reţeaua să fie pătrată, adică $a = b$, $\gamma = 90°$. Prezenţa axelor 3 şi 6 implică neapărat ca reţeaua să fie hexagonală, adică $a = b$, $\gamma = 120°$.

Pentru a afla ce determină existenţa unui plan m, normal la planul reţelei, vom exprima vectorii bazei, $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, prin versorii $\boldsymbol{i}$ şi $\boldsymbol{j}$ ai sistemului de coordonate

$$\boldsymbol{a} = a_x\boldsymbol{i} + a_y\boldsymbol{j},$$
$$\boldsymbol{b} = b_x\boldsymbol{i} + b_y\boldsymbol{j}. \tag{9.1}$$

Să considerăm că planul de simetrie m trece prin axa X. Atunci prin oglindirea pe acest plan, obţinem

$$\boldsymbol{a}' = a_x\boldsymbol{i} - a_y\boldsymbol{j},$$
$$\boldsymbol{b}' = b_x\boldsymbol{i} - b_y\boldsymbol{j}. \tag{9.2}$$

Pentru ca translaţiile $\boldsymbol{a}'$ şi $\boldsymbol{b}'$ să fie tot translaţii ale reţelei, există numai două posibilităţi: prima este $\boldsymbol{a} = a\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{b} = b\boldsymbol{j}$, ceea ce dă o *reţea dreptunghiulară*, $a = b$, $\gamma = 90°$, iar a doua, $\boldsymbol{b}' = \boldsymbol{a} - \boldsymbol{b}$, adică $b'_x = a_x - b_x$, $b'_y = a_y - b_y$. Această soluţie se va obţine din (9.1) şi (9.2) pentru $a_y = 0$ şi $a_x = 2b$, adică pentru $\boldsymbol{a} = a\boldsymbol{i}$ şi $\boldsymbol{b} = 1/2a_x\boldsymbol{i} + b_y\boldsymbol{j}$.

În al doilea caz, pe translaţiile $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ se construieşte *celula dreptunghiulară centrată*, adică o celulă care are în centru încă un nod, $a \neq b$, $\gamma = 90°$. Această reţea cristalografică poate fi trasată şi cu ajutorul unei reţele matematice alcătuite din romburi, obţinîndu-se o celulă primitivă necentrată. Celula centrată este totuşi mai comodă, ea permiţînd folosirea sistemului de coordonate ortogonale.

Prin urmare, avem cinci reţele Bravais plane: paralelograme, dreptunghiuri, romburi, triunghiuri şi pătrate.

La fel se deduc cele 14 reţele Bravais spaţiale (tabelele 9.1 şi 9.2). Celulele elementare în reţelele Bravais se aleg astfel încît: 1) simetria lor să corespundă simetriei întregii reţele (mai exact: simetria celulei elementare trebuie să coincidă cu simetria clasei holoedrice a sistemului căruia îi aparţine cristalul); 2) numărul unghiurilor drepte şi al laturilor egale să fie maxim; 3) volumul celulei să fie minim.



Tabelul 9.1

Cele 14 rețele Bravais

Singonia	Rețeaua cristalografică				
	primitivă	cu bazele centrate	centrată în volum	cu fețele centrate	romboedrică
triclinică	P				
monoclinică	P	C			
rombică	P	C	I	F	
tetragonală	P		I		
hexagonală	P				R
cubică	P		I	F	

Rețelele Bravais joacă un rol enorm în cristalografie. Orice structură cristalină poate fi reprezentată cu ajutorul uneia dintre cele 14 rețele Bravais.

Există următoarele tipuri de rețele Bravais : *P* — primitive, *I* — centrate în volum, *F* — cu fețele centrate, *A*, *B*, *C* — cu bazele centrate (centrate lateral) (literele *A*, *B*, *C* indicînd care dintre cele trei perechi de fețe este centrată : *A* — sînt centrate fețele

normale la translaţia a, adică la axa X ş.a.m.d.), R — romboedrică.

Celulele primitive Bravais sînt celulele principale, în funcţie de care se disting singoniile cristalografice. În sistemul trigonal, alături de prismă ca celulă elementară primitivă poate fi şi rom-

Tabelul 9.2

Notarea tipului de celulă şi a grupului translaţiilor pentru cele 14 reţele Bravais

Singonia	Reţeaua cristalografică				
	Primitivă	Cu bazele centrate	Centrată în volum	Cu feţele centrate	Romboedrică
Triclinică	$P,\ \Gamma_{tr}$				
Monoclinică	$P,\ \Gamma_m$	$C,\ \Gamma_m^b$			
Rombică	$P,\ \Gamma_0$	$C,\ \Gamma_m^b$	$I,\ \Gamma_0^v$	$F,\ \Gamma_0^t$	
Tetragonală	$P,\ \Gamma_q$		$I,\ \Gamma_q^v$		
Hexagonală	$P,\ \Gamma_h$				$R,\ \Gamma_{rh}$
Cubică	$P,\ \Gamma_c$		$I,\ \Gamma_c^v$	$F,\ \Gamma_0^t$	

boedrul (R) — figură în care $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$. În singonia hexagonală, drept celulă elementară primitivă se ia prisma avînd muchia paralelă cu axa 6, iar baza în formă de romb, $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$.

Celula elementară a structurii hexagonale este o prismă cu şase feţe, formată din trei celule elementare primitive; ea reflectă atît simetria cristalelor trigonale cît şi a celor hexagonale. Pentru singonia hexagonală este mai comod, uneori, să se utilizeze aşa-numita *celulă ortohexagonală*, de asemenea neprimitivă, pentru care $a \neq c$, $b = a\sqrt{3}$.

În celulele primitive nodurile reţelei sînt aşezate numai în vîrfurile celulei, pe cînd în celulele complexe mai există şi alte noduri: în celula centrată în volum, I, încă un nod în centrul celulei; în celula cu feţe centrate, F, încă un nod în centrul fiecărei feţe; în celula cu bazele centrate, C (sau A, sau B), cîte un nod în centrul unei perechi de feţe paralele. Nodul dintr-un vîrf al unei celule aparţine simultan celor opt celule vecine, iar nodul din centrul unei feţe aparţine concomitent la două celule vecine. Rezultă de aici că în total volumului unei celule îi revin: celulă P — 1 nod, celulă I — 2 noduri, celulă F — 4 noduri, celulă C — 2 noduri.

O celulă primitivă hexagonală poate fi realizată şi folosind o celulă romboedrică, R, însă în acest caz romboedrul nu trebuie să fie primitiv: el are două noduri suplimentare, de coordonate [[1/3, 2/3, 1/3]] şi [[2/3, 1/3, 2/3]].

Rețeaua romboedrică poate fi considerată, de asemenea, ca o rețea hexagonală centrată : într-o celulă hexagonală primitivă există două noduri suplimentare cu coordonatele [[00,1/3]] și [[00,2/3]].

Toate cele patru tipuri de celule — *P*, *I*, *F*, *C* — există numai în singonia rombică, celelalte singonii conținînd un număr mai mic de celule (v. tab. 9.1). De exemplu, în singonia cubică nu există celulă Bravais cu bazele centrate, dat fiind că ea ar contrazice simetria rețelei cubice : dacă este centrată o pereche de fețe ale cubului, atunci, datorită simetriei cubului, obligatoriu vor fi centrate și celelalte două perechi de fețe, adică celula *C* va deveni celulă *F*. În singonia tetragonală nu există celulă *C* : ea ar fi compatibilă cu simetria rețelei, însă nu ar satisface condițiile de selecționare a celulelor Bravais ; în locul ei se poate, la fel de bine, lua o celulă primitivă, al cărei volum este de două ori mai mic.

Folosind aceleași raționamente se poate demonstra că celulele reprezentate în tabelul 9.1 sînt complet suficiente pentru toate singoniile. Cele 14 rețele Bravais epuizează toate rețelele de translație posibile, care descriu orice structură cristalină.

În structura unui cristal rețelele Bravais se pot întrepătrunde una cu alta, astfel încît în vîrfurile diferitelor rețele să poată sta fie același tip de atomi, fie atomi diferiți, atît sfero-simetrici, cît și cu simetrie cristalografică reală. Toate tipurile de structuri sînt descrise de 230 grupuri de simetrie spațială, care se formează din combinații ale elementelor de simetrie ale structurilor infinite.

Înmulțirea elementelor de simetrie ale structurilor se supune acelorași teoreme, 1—6 (§ 3 și § 6), care descriu simetria unui poliedru. În afară de aceasta, datorită adăugirii repetărilor infinite, apar combinații noi. Vom enunța cîteva dintre ele (numerotarea teoremelor o continuă pe cea din § 3 și § 6). Ca și pentru înmulțirea elementelor de simetrie ale poliedrelor, nu vom da demonstrații amănunțite, ci numai exemple ilustrative (demonstrația cea mai completă și perfectă a fost dată de N. V. Belov — vezi N. V. Belov, 1951).

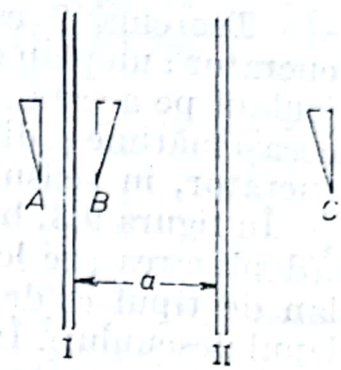
T e o r e m a 7. Reflexia succesivă în două planuri de simetrie paralele este echivalentă cu o translație avînd parametrul $t = 2a$, unde a este distanța dintre planuri.

În figura 9.2, I și II sînt două planuri de simetrie paralele. Reflexia în planul I dă transformarea $A \rightarrow B$, reflexia în planul II dă $B \rightarrow C$ și se vede direct din desen că distanța dintre punctele corespunzătoare triunghiurilor A și C este egală cu $2a$.

Două reflexii succesive $A \rightarrow B$ și $B \rightarrow C$ pot fi înlocuite cu o translație $A \rightarrow B = 2t$

$$m_{II} \cdot m_{I} = t. \qquad (9.3)$$

Fig. 9.2. Două planuri de reflexie paralele sînt echivalente unei translaţii.



T e o r e m a 7a. Oricare translaţie t poate fi înlocuită cu o reflexie în două planuri paralele, care se află la distanţa $t/2$ unul de altul.

Teorema 7a, reciproca teoremei 7, se demonstrează analog şi rezultă din figura 9.2.

T e o r e m a 8. Un plan de simetrie şi o translaţie perpendiculară pe el cu parametrul t generează noi planuri de simetrie, „intercalate", paralele cu planul generator, de tip analog cu acesta, la o distanţă $t/2$ de el.

În figura 9.3, a, translaţia este perpendiculară la planul de simetrie I. Reflexia în planul I dă transformarea $A \rightarrow B$, translaţia t, transformarea $A \rightarrow C$, $B \rightarrow D$. Se vede că B şi C, ca şi

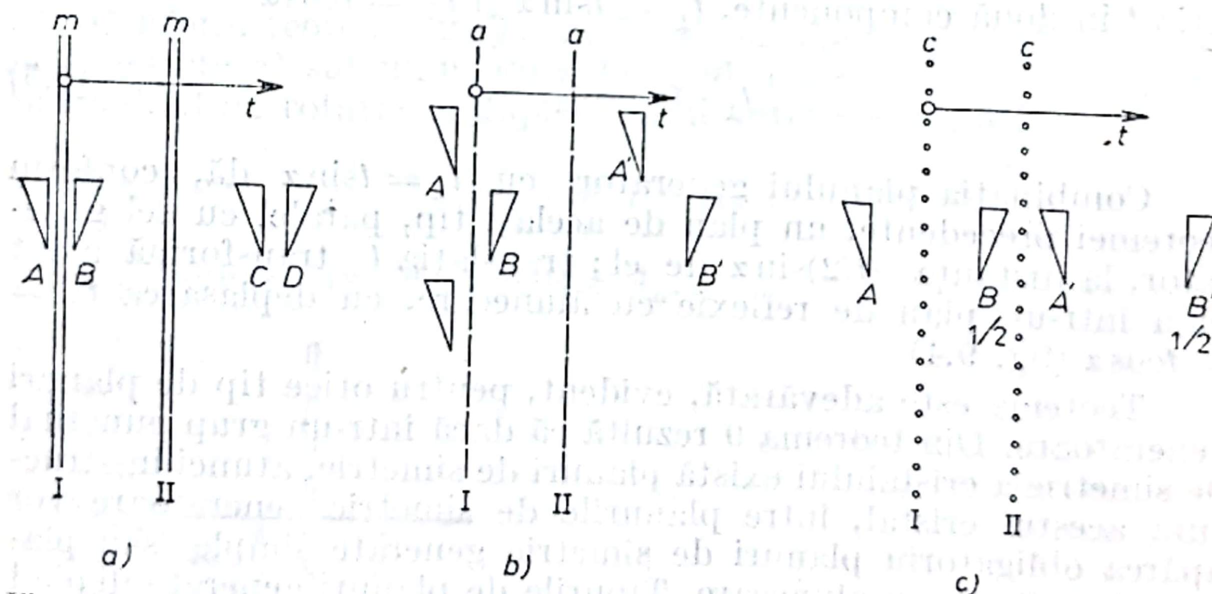


Fig. 9.3. Un plan de simetrie şi o translaţie perpendiculară pe el generează un plan intermediar cu acelaşi nume : plan de simetrie (a), plan de reflexie-alunecare, deplasarea făcîndu-se în planul desenului (b), plan de reflexie-alunecare, deplasarea făcîndu-se perpendicular la planul desenului (c).

A şi D, sînt legate prin încă o reflexie în planul de simetrie II generat (intercalat)

$$m_{I} \cdot t_{\perp} = m_{II}. \tag{9.4}$$

Teorema 8 este adevărată independent de tipul planului generator : un plan de reflexie cu alunecare și o translație t, perpendiculară pe acesta, vor genera un plan de reflexie cu alunecare cu aceeași mărime și direcție a alunecării, aflat la distanța $t/2$ de planul generator, în sensul translației.

În figura 9.3, b, teorema este ilustrată pentru un plan de tipul a (deplasarea are loc după axa X), iar în figura 9.3, c, pentru un plan de tipul c (deplasarea se produce după axa Z, normală la planul desenului). În ambele cazuri translația t este perpendiculară la planul generator I.

Transformarea în planul de reflexie cu alunecare dă $A \to B$ (fig. 9.3, c); în cazul unui plan c, figura simbol B este ridicată deasupra planului desenului cu $c/2$, ceea ce este notat cu semnul „1/2”. Translația t dă transformările $A \to A'$ și $B \to B'$. Evident, între B și A, la distanța $t/2$, trece planul generat II, de reflexie cu alunecare, de același tip cu planul generator, I.

T e o r e m a 9. Planul de simetrie și translația t, care face cu planul unghiul α, generează un plan de reflexie cu alunecare, paralel cu planul generator, la o distanță de $(t/2)\sin\alpha$ de el, în sensul în care are loc translația ; mărimea alunecării după planul generat este egală cu $t\cos\alpha$.

Pentru demonstrarea acestei teoreme să descompunem translația t în două componente, $t_{\perp} = t\sin\alpha$ și $t_{\parallel} = t\cos\alpha$

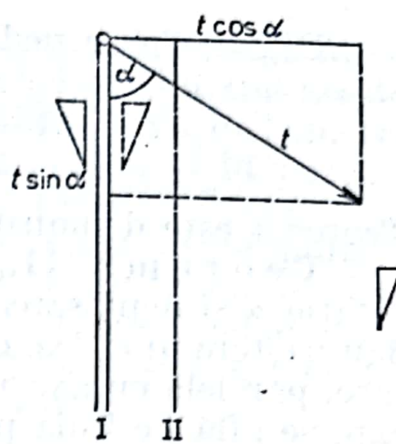
$$t_{\perp} \cdot t_{\parallel} = t_{\alpha}. \tag{9.5}$$

Combinația planului generator cu $t_{\perp} = t\sin\alpha$ dă, conform teoremei precedente, un plan de același tip, paralel cu cel generator, la distanța $(t/2)\sin\alpha$ de el; translația $t_{\parallel}$ transformă acest plan într-un plan de reflexie cu alunecare, cu deplasarea $t_{\parallel} = t\cos\alpha$ (fig. 9.4).

Teorema este adevărată, evident, pentru orice tip de planuri generatoare. Din teorema 9 rezultă că dacă într-un grup punctual de simetrie a cristalului există planuri de simetrie, atunci în structura acestui cristal, între planurile de simetrie generatoare vor apărea obligatoriu planuri de simetrie generate simple sau planuri de reflexie cu alunecare. Tipurile de planuri generate depind atît de tipurile de planuri generatoare, cît și de setul translațiilor celulei elementare Bravais, adică de tipul rețelei Bravais.

T e o r e m a 10. O axă de simetrie cu unghiul de rotație α și o translație t, perpendiculară pe ea, generează o axă de simetrie de același tip, paralelă cu axa inițială, plasată la distanța de $(t/2)\sin(\alpha/2)$, care se află pe dreapta perpendiculară pe translația t, în mijlocul ei.

Fig. 9.4. Planul m şi o translaţie care face cu acesta unghiul α dau naştere unui plan de reflexie cu alunecare.



Fie (fig. 9.5) A_α punctul de ieşire a unei axe simple de simetrie, cu unghiul de rotaţie α, iar t o translaţie, perpendiculară pe ea. Conform teoremei 2a (§ 3) vom înlocui axa A_α cu două planuri de simetrie care se intersectează, luînd unul dintre aceste planuri, $m_\perp$(I), perpendicular pe translaţia t, iar pe cel de al doilea, $m_{||}$ (II), sub unghiul $\alpha/2$ faţă de primul. Conform teoremei 7a, vom înlocui translaţia t cu două planuri de simetrie paralele, m_{I} şi m_{III} (III); m_{III} împarte translaţia t în două părţi egale. Două reflexii consecutive în planul m_{I} dau în total transformarea unitate

$$A_\alpha \cdot t_\perp = m_{\mathrm{I}} \cdot m_{\mathrm{II}} \cdot m_{\mathrm{I}} \cdot m_{\mathrm{II}} = 1 \cdot m_{\mathrm{II}} \cdot m_{\mathrm{III}}. \tag{9.6}$$

Conform teoremei 2 (§ 3), cele două planuri de simetrie care se intersectează sub un unghi $\alpha/2$ sînt identice cu o axă de simetrie cu unghiul de rotaţie α, după linia de intersecţie a lor

$$m_{\mathrm{II}} \cdot m_{\mathrm{III}} = A'_{\alpha/2},$$

adică generează axa de simetrie A_α.

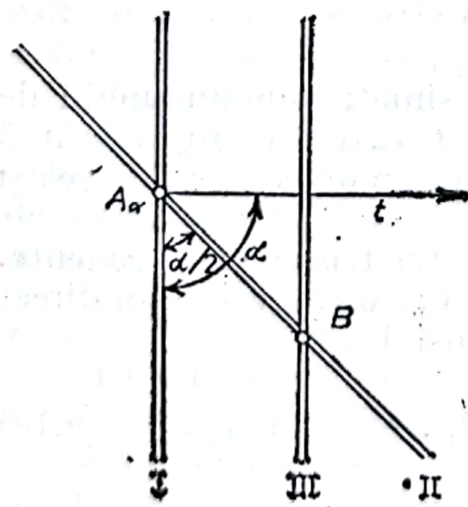


Fig. 9.5. O axă de simetrie şi translaţia perpendiculară pe ea generează o axă de simetrie paralelă.

Din desen se vede că

$$AB = \frac{t/2}{\sin(\alpha/2)} = \frac{t}{2\sin(\alpha/2)}.$$

Teorema este demonstrată.

Teorema 11. O axă de simetrie elicoidală cu unghiul de rotație α și deplasarea t și cu o translație t perpendiculară pe ea, dau naștere unei axe elicoidale cu același unghi și cu aceeași deplasare, paralelă cu axa inițială, la o distanță de ea de $(t/2)\sin(\alpha/2)$, care se află pe linia perpendiculară la translația t, la mijlocul ei.

Demonstrația se reduce la demonstrația precedentă, cu singura deosebire că axa elicoidală $A_{\alpha t_1}$ o reprezentăm drept produsul a două elemente $A_{\alpha_1 t_1} = A_\alpha \cdot t_1$, dintre axa simplă de simetrie, A_α, și translația t_1 de-a lungul axei

$$\begin{aligned} A_\alpha \cdot t_1 \cdot t_\perp &= m_\perp \cdot m_{||} \cdot t_1 \cdot m_{\mathrm{I}} \cdot m_{\mathrm{III}} = \\ &= 1 \cdot t_{\mathrm{I}} \cdot m_{\mathrm{II}} \cdot m_{\mathrm{III}} = B'_\alpha \cdot t_{\mathrm{I}} = B_{\alpha \cdot t_1}, \end{aligned} \tag{9.8}$$

adică obținem o axă elicoidală cu același unghi de rotație, α, și cu aceeași deplasare, t_1, axă plasată în punctul B (fig. 9.5).

Teorema 12. O axă de simetrie cu un unghi de rotație α și o translație t, făcînd cu ea unghiul β, generează o axă de simetrie elicoidală.

Pentru demonstrație descompunem translația t în componentele $t_\perp = t\cos\beta$ și $t_{||} = t\sin\beta$

$$A_\alpha \cdot t = A_\alpha \cdot t_\perp \cdot t_{||}. \tag{9.9}$$

Conform relațiilor (9.6), (9.7), (9.8) obținem o axă elicoidală de simetrie cu un unghi de rotație α, cu o valoare a deplasării $t\sin\beta$ la distanța $\dfrac{t}{2\sin(\alpha/2)}$ față de A.

Teorema 13. O axă elicoidală de simetrie cu un unghi de rotație α și deplasarea t_1 și cu translația t, care face un unghi β cu axa, dau naștere unei axe elicoidale de simetrie avînd același unghi de rotație.

Demonstrația se reduce la demonstrația teoremei precedente, cu singura deosebire că rotația elicoidală $A_{\alpha_1 t_1}$ o reprezentăm direct ca produsul dintre o rotație simplă și translația t_1

$$A_{\alpha_1 t_1} = A_\alpha \cdot t_1 \cdot t_\perp \cdot t_{||} = A'_\alpha \cdot t_1 \cdot t_{||} = A'_{\alpha, T}, \tag{9.10}$$

unde translația $T = t_1 \cdot t_{||}$.

Din teoremele 12 și 13 rezultă că dacă printr-un unghi al celulei elementare trece o axă de simetrie, atunci combinația acestei axe cu translațiile grupului Bravais generează axe de simetrie simple și elicoidale, pe muchiile celulei, în centru și în pozițiile date de teoremele 12 și 13.

Deoarece o axă de simetrie α include în ea rotațiile multiple ale lui α, axele de simetrie care rezultă pot fi de ordine diferite. Vom analiza acest fapt luînd ca exemplu axa 4, care include rotațiile 1, $\pi/2$, π, $3\pi/2$. Să-i adăugăm translațiile t_1 și t_2 ale celulei elementare primitive. Rotațiile rezultante vor fi

Rotația	Translațiile		
	t_1	t_2	t_1+t_2
1	1	1	1
$\pi/2$	$\pi/2$	$3\pi/2$	$\pi/2$
π	π	π	π
$3\pi/2$	$3\pi/2$	$3\pi/2$	$3\pi/2$

Din tabel se vede că axa 4, care trece printr-un vîrf al celulei primitive, generează o axă 4 în centrul celulei și axe 2 la mijlocul muchiilor ei.

În figura 9.6 sînt reprezentate combinațiile axelor de simetrie cu translațiile celulei Bravais primitive: axa 2 generează o axă 2 în centrul celulei și la mijlocul muchiilor; axa 3 generează două axe 3 în interiorul celulei; axa 4 generează o axă 4 în centrul celulei și axe 2 în mijlocul laturilor; axa 6 generează axe 2 în centrul celulei și în mijlocul muchiilor și axe 3 în interiorul celulei.

În figura 9.7 sînt ilustrate combinațiile axei de simetrie 4 cu translațiile celulei primitive, P, și ale celulei Bravais, I, centrate în volum: combinațiile de axe generate depind de setul translațiilor.

T e o r e m a 14. O axă de inversie-rotație cu un unghi de rotație α și o translație t, perpendiculară pe axă, generează tot o axă de inversie-rotație, paralelă cu axa generatoare.

Descompunînd axa de inversie-rotație A_α în axa de rotație simplă A_α și inversia în centrul de simetrie, $\bar{1}$, reducem demonstrația la demonstrația precedentă. Aplicînd teorema 14 axei de inversie $\bar{1}$, obținem c o r o l a r u l: un centru de simetrie și o translație t generează un nou centru de simetrie, deplasat față de centrul inițial în sensul translației t cu o jumătate din mărimea ei.

T e o r e m a 15. O axă de inversie-rotație avînd unghiul de rotație α și o translație t, care face cu această axă unghiul β, generează o axă de inversie de același unghi α, paralelă cu axa inițială.

Fig. 9.6. Axele de simetrie generate prin translațiile celulei Bravais P în combinație cu axele 2, 3, 3_1, 3_2, 6, care trec prin vîrful celulei, normal la planul desenului.

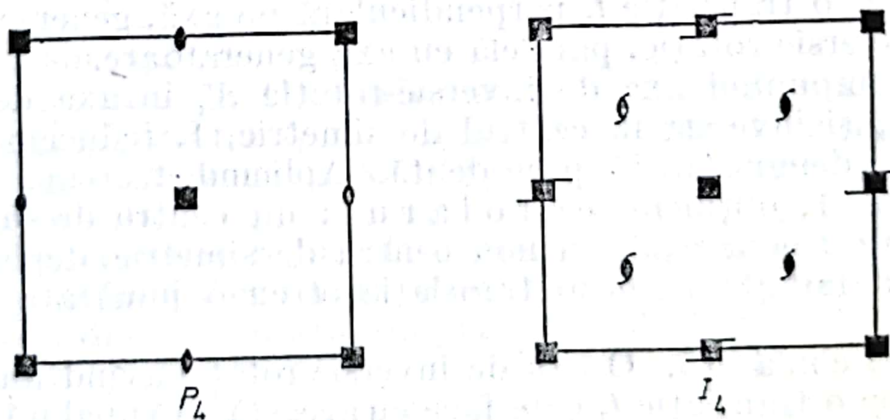


Fig. 9.7. Axele de simetrie generate prin translații ale celulelor Bravais P și I în combinație cu axa 4.

Demonstrația o vom reduce la demonstrația precedentă: descompunem translația t în $t_{||}$ și $t_{\perp}$

$$A_{\bar{\alpha}\cdot t} = A_{\alpha} \cdot \bar{1} \cdot t_{||} \cdot t_{\perp} = B_{\alpha} \cdot t_{||} \cdot \bar{1} = B_{\bar{\alpha}} \cdot t_{||} = B'_{\alpha}$$

(după ce am folosit formulele (9.8) și (9.9)) și obținem

$$AB' = \frac{t}{2} \sin \beta / \cos(\alpha/2).$$

Toate teoremele din § 3 și din § 6 reprezintă cazuri particulare ale înmulțirii operațiilor de simetrie fără translații. Adăugarea translațiilor lărgește lista elementelor de simetrie generate. Astfel, în teorema 2, § 3, s-a demonstrat că planurile de simetrie m, care se intersectează, generează o axă de simetrie de rotație. Din argumentarea demonstrațiilor precedentelor teoreme se vede că dacă planurile generatoare vor fi planuri de reflexie cu alunecare, atunci elementele care iau naștere se dovedesc a fi axe elicoidale, care trec prin linia de intersecție a planurilor sau sînt deplasate față de ea. Teorema asupra intersectării axelor de simetrie va da, și ea, o întreagă mulțime de soluții diferite, dacă se ține seama și de axele elicoidale de simetrie.

Teoremele și exemplele analizate nu epuizează combinațiile posibile ale transformărilor de simetrie infinite, dar ele ilustrează convingător diversitatea acestor combinații și principiul deducerii lor.

§ 10. CELE 230 DE GRUPURI SPAȚIALE DE SIMETRIE

Se numește *grup spațial de simetrie* combinarea tuturor transformărilor de simetrie ale unei structuri cristaline. Un grup spațial de simetrie caracterizează simetria structurii cristaline, exact după cum grupul punctual de simetrie caracterizează simetria formei exterioare a cristalului și simetria proprietăților lui macroscopice.

Fiecărui grup punctual îi corespund cîteva grupuri spațiale. Pentru ca din grupul spațial de simetrie al unui cristal să se obțină grupul lui punctual, trebuie să anulăm mintal toate translațiile, adică să transformăm planurile de reflexie cu alunecare în planuri de oglindire simple, axele elicoidale în axe de simetrie de rotație obișnuite și să reducem toate elementele de simetrie rămase într-un singur punct.

Tabelul 10.1

Împărțirea celor 230 de grupuri spațiale în clase, singonii și tipuri de rețele

Singonia	Clasa	Tipul de rețea					
		P	*A, C*	*F*	*I*	*R*	Total
Triclinică	1	1	—	—	—	—	1
	$\bar{1}$	1	—	—	—	—	1
	Total	2	—	—	—	—	2
Monoclinică	2	2	1	—	—	—	3
	m	2	2	—	—	—	4
	2/*m*	4	2	—	—	—	6
	Total	8	5	—	—	—	13
Rombică	222	4	2	1	2	—	9
	*mm*2	10	7	2	3	—	22
	mmm	16	6	2	4	—	28
	Total	30	15	5	9	—	59
Tetragonală	4	4	—	—	2	—	6
	$\bar{4}$	1	—	—	1	—	2
	4/*m*	4	—	—	2	—	6
	422	8	—	—	2	—	10
	4*mm*	8	—	—	4	—	12
	$\bar{4}2m$	8	—	—	4	—	12
	4/*mmm*	16	—	—	4	—	20
	Total	49	—	—	19	—	68
Hexagonală	3	3	—	—	—	1	4
	$\bar{3}$	1	—	—	—	1	2
	32	6	—	—	—	1	7
	3*m*	4	—	—	—	2	6
	$\bar{3}m$	4	—	—	—	2	6
	6	6	—	—	—	—	6
	$\bar{6}$	1	—	—	—	—	1
	6/*m*	2	—	—	—	—	2
	622	6	—	—	—	—	6
	6*mm*	4	—	—	—	—	4
	$\bar{6}m2$	4	—	—	—	—	4
	6/*mmm*	4	—	—	—	—	4
	Total	45	—	—	—	7	52
Cubică	23	2	—	1	2	—	5
	*m*3	3	—	2	2	—	7
	432	4	—	2	2	—	8
	$\bar{4}3m$	2	—	2	2	—	6
	*m*3*m*	4	—	4	2	—	10
	Total	15	—	11	10	—	36

Deducerea dintr-un grup punctual a tuturor grupurilor spaţiale care îi aparţin este o problemă mult mai complicată. Aici trebuie examinate toate combinaţiile de elemente de simetrie şi de reţele Bravais posibile. Astfel, de exemplu, dacă într-un grup punctual intră axe 3 şi 2, atunci în grupul spaţial acestea pot fi întîlnite ca axe 3, 3_1, 3_2, 2 şi 2_1 şi trebuie încercate toate combinaţiile posibile de axe şi translaţii.

Astfel se obţin cele 230 de grupuri de simetrie spaţiale continue ale spaţiului cristalin, sau grupurile de simetrie Fiodorov. Fiecare dintre aceste grupuri satisface postulatele teoriei grupurilor, adică formează un grup matematic (tab. 10.1).

Cele 230 grupuri spaţiale au fost deduse, în anii 1890—1894, concomitent şi independent, de către E. S. Fiodorov şi A. Schoenflies, cu două decenii înainte de a se fi reuşit să se confirme experimental existenţa structurilor cristaline (în anul 1912 Laue a dovedit primul difracţia radiaţiilor Röntgen pe structurile cristaline). E. S. Fiodorov a scris relativ la aceasta, în anul 1914 : „Nu mă pot abţine să nu declar că nu am crezut niciodată că voi apuca să trăiesc să văd determinarea concretă a distribuţiei atomilor, prevăzută în lucrările mele la care m-am referit *. Într-o scrisoare adresată profesorului Groth ** îi scriam că de fapt aplicaţiile detaliate ale sistemelor prezise în aceste cercetări vor începe să se realizeze peste încă 100 de ani".

Pentru notarea grupurilor spaţiale se utilizează simbolurile internaţionale precum şi simbolurile lui Schoenflies şi cele ale lui E. S. Fiodorov.

Simbolul internaţional al unui grup spaţial este astfel alcătuit, încît după forma simbolului să se poată reprezenta mintal întreaga dispoziţie reciprocă a elementelor de simetrie, dacă sînt cunoscute teoremele fundamentale asupra compunerii elementelor de simetrie infinite şi regulile de scriere a simbolurilor, date în tabelul 10.2.

În simbolistica Schoenflies grupurile spaţiale se notează pur şi simplu prin numărul de ordine al grupului în interiorul clasei date. După forma simbolului Schoenflies nu se poate determina simetria unui grup spaţial, fiind necesar să se apeleze la tabelele în care sînt comparate simbolurile Schoenflies cu simbolurile internaţionale.

După E. S. Fiodorov grupurile spaţiale se notează cu numere, avînd indicii *s*, *h*, *a*. *s* constituie grupurile simorfe : paralel cu axele simple de rotaţie ale grupului punctual, în grupul spaţial se află

---

* Este vorba despre acele lucrări ale lui E. S. Fiodorov, în care este dată deducerea celor 230 de grupuri spaţiale.

** P. Groth — contemporan de-al lui E. S. Fiodorov, autorul unei „Cristalografii" fundamentale (Groth, 1879).

Tabelul 10.2

Regulile de scriere a simbolului unui grup spațial

Singonia	Poziția			
	I	II	III	IV
Triclinică	Tipul de rețea Bravais	Elementul de simetrie conținut		
Monoclinică		Elementul de simetrie conținut	Plan normal la axa 2	
		2 sau 2_1		
Rombică		Plan normal la, sau axă paralelă cu		
		axa *X*	axa *Y*	axa *Z*
Tetragonală Hexagonală		Axă de ordin superior (sau plan normal la ea)	Plan sau axă de coordonate	Plan sau axă diagonală
Cubică		Planuri sau axe de coordonate	3	Planuri sau axe diagonale

axe simple sau elicoidale de același ordin, în paralel cu planurile *m* ale grupului punctual, în grupul spațial planuri *m* sau planuri de reflexie cu alunecare. Elementele de simetrie similare se intersectează într-un singur punct. *h* sînt grupurile hemisimorfe: paralel cu toate axele de rotație ale grupului punctual de simetrie se află axe de simetrie de rotație sau elicoidale de același fel, pe cînd paralel cu planurile *m* ale grupului punctual, în grupul spațial există numai planuri de reflexie cu alunecare. Axele similare se intersectează într-un singur punct. *a* constituie grupurile asimorfe: cel puțin unul dintre sistemele de axe ale grupului spațial, paralele cu axele de simetrie corespunzătoare, este format numai din axe elicoidale.

Ca și la simbolul grupului punctual, într-un simbol al unui grup spațial se scriu numai elementele de simetrie generatoare. Ordinea scrierii are o valoare esențială. Într-un simbol al unui grup spațial pe primul loc se află totdeauna simbolul rețelei Bravais. În continuare urmează elementele de simetrie generatoare, fiecare într-o ordine strict determinată (tab. 10.2).

Din regulile de scriere a simbolurilor din singonia rombică și singoniile categoriei medii reiese clar de ce se deosebesc elemente de simetrie de coordonate de cele diagonale, în simbolurile grupului punctual, ca de pildă $4mm$, sau $6mm$. Din teoremele 8 și 9, § 9, se vede că adăugarea translației la elementele de simetrie de coordonate și la cele diagonale nu mai are aceeași valoare. Din această cauză, în simbolul elementului punctual aceste două posibilități sînt specificate.

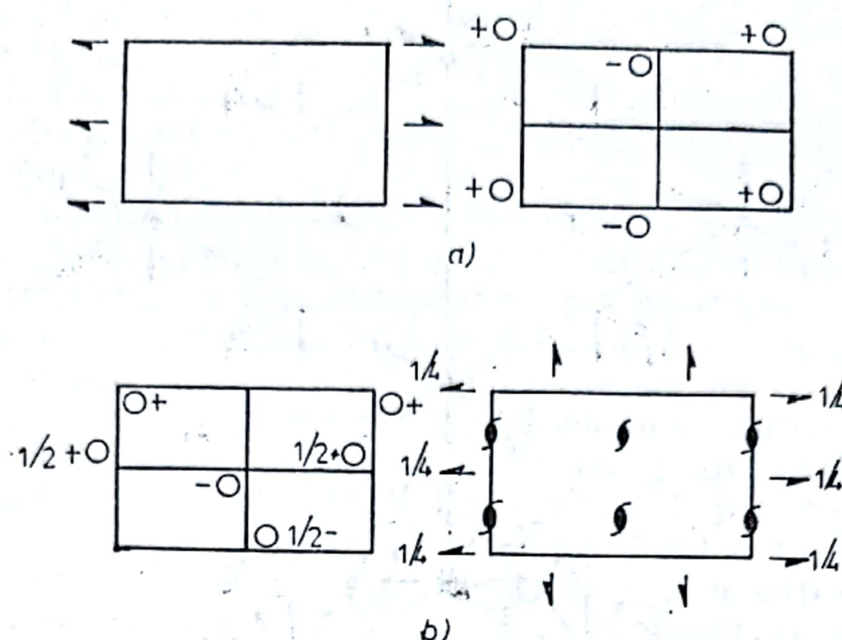


Fig. 10.1. Grupurile spaţiale $P2_1$ (*a*) şi $P2_12_12$ (*b*), care caracterizează modificarea simetriei sării Seignette în cadrul tranziţiei de fază.

Într-un simbol al grupurilor singoniei cubice, întotdeauna există cifra 3, care se află pe locul al treilea. Ea înseamnă prezenţa obligatorie în această singonie a patru axe 3. Această cifră se scrie pe locul al treilea şi nu pe al doilea, spre deosebire de simbolul singoniei trigonale, unde cifra 3 pe locul al doilea înseamnă o singură axă 3.

Absenţa unui element de simetrie în poziţia respectivă se notează cu cifra 1.

Să discutăm cîteva exemple.

Grupul punctual 2. Conform tabelului 9.1, în singonia monoclinică sînt posibile celulele Bravais *P* şi *I*. Produsul dintre singura operaţie de simetrie, 2, şi translaţia *t* dă o axă elicoidală $2_1 : 2 \cdot t = 2_1$. Conform teoremei 10, translaţiile unei celule *P* în combinaţii cu axele 2 sau 2_1 generează axe intercalate, de acelaşi nume, iar conform teoremei 12, translaţiile unei celule *I* generează axe 2 şi 2_1, care alternează. Astfel se obţin trei grupuri spaţiale: $P2$, $P2_1$, $I2$. Deoarece axele elicoidale sînt neutre, toate aceste grupuri spaţiale sînt şi ele neutre. Axa 2 sau 2_1 este polară. Grupul spaţial $P2_1$ este caracteristic structurii sării Seignette în faza seignettoelectrică.

La temperatura de −18 °C sau +24 °C, sarea Seignette trece din faza monoclinică seignettoelectrică în faza paraelectrică, rombică, caracterizată prin grupul spaţial $P2_12_12$. În figura 10.1 sînt reprezentate aceste grupuri în aranjare standard: axele elicoidale 2_1 se află în planul *XY*, fiind notate cu săgeţi.

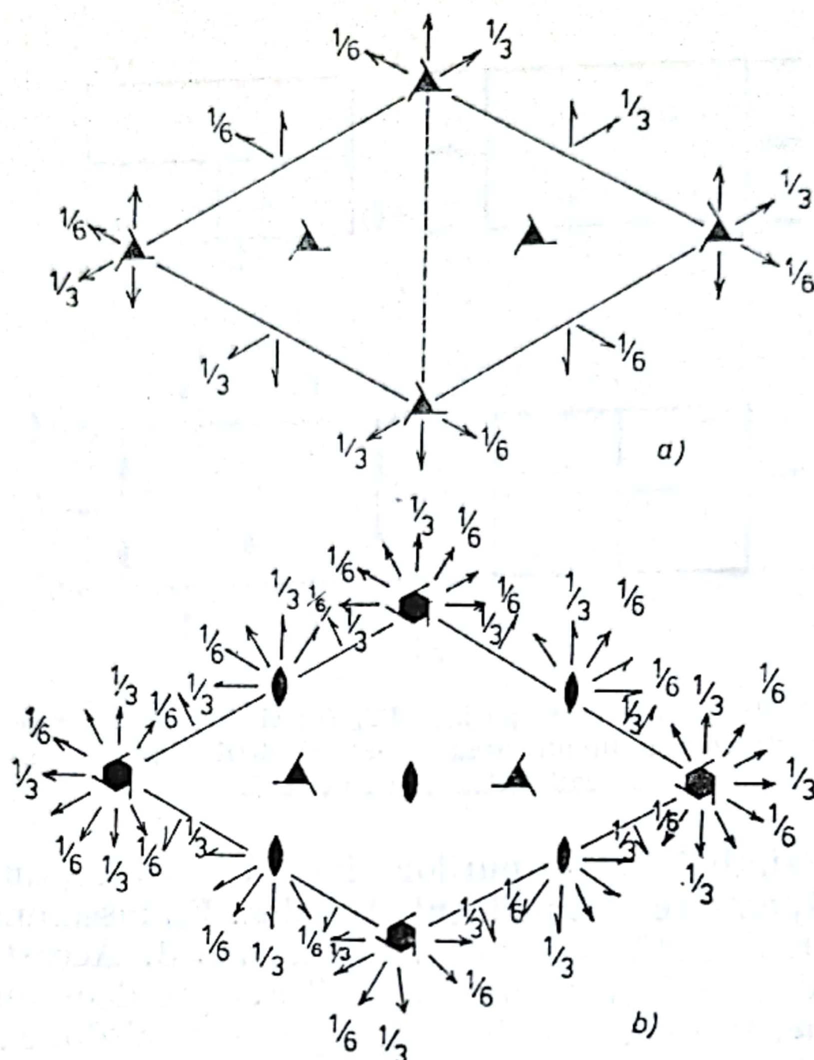


Fig. 10.2. Grupurile spațiale $P3_121$ (*a*) și $R6_222$ (*b*), care caracterizează modificarea simetriei cuarțului în cadrul tranziției de fază.

Grupului punctual de simetrie al cuarțului, 32, îi aparțin, corespunzător, grupurile spațiale

$P321$	$P3_121$	$P3_221$
$P312$	$P3_112$	$P3_212$
	$R32$	

În grupurile spațiale enumerate în prima linie translațiile cele mai mici din planul bazei sînt paralele cu axele 2, iar în grupurile enumerate în grupa a doua formează cu ele unghiuri de 60°.

Grupul spațial al structurii de tipul cuarțului, $P3_121$ sau $P3_221$, poate fi drept sau stîng, ceea ce are drept consecință existența cristalelor de cuarț enantiomorfe drepte sau stîngi (fig. 3.9) și prezența la ele a fenomenului de rotire a planului de polarizare. O asemenea structură o are cuarțul de temperatură joasă, de tipul α; peste +573 °C el trece în modificația de temperatură înaltă, β,

avînd clasa 622. În acest caz, cuarțul de tipul α trece tot în cuarț drept, de tipul β ($P6_222$), iar cel stîng ($P3_321$), în stîng ($P6_422$) (fig. 10.2). Totodată, axele 2 își pierd polaritatea.

În îndreptarul internațional „Tabele internaționale" (*International Tables*, 1952), sînt date desenele și simbolurile tuturor celor 230 grupuri spațiale. Simbolurile internaționale date în prima ediției a „Tabelelor internaționale" (simboluri vechi) se deosebesc întrucîtva de cele adoptate azi, așa-numitele simboluri „noi". Desenele sînt făcute folosind notațiile convenționale, date în tabelul 3.1.

Odată cu schemele de aranjare a elementelor de simetrie, în „Tabelele internaționale", pentru fiecare grup spațial sînt date coordonatele și schemele sistemelor regulate de puncte. Se numește *sistem regulat de puncte* totalitatea punctelor legate între ele prin elementele de simetrie ale grupului spațial. Un sistem regulat de puncte se poate obține dintr-un singur punct, repetîndu-l prin aplicarea tuturor elementelor de simetrie ale grupului spațial.

§ 11. BAZA VECTORIALĂ RECIPROCĂ ȘI REȚEAUA RECIPROCĂ

Pe lîngă baza fundamentală, $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$, în cristalografie se utilizează baza vectorială reciprocă, care constă tot din trei vectori, pe care-i vom nota cu aceeași literă, $\boldsymbol{a}$, dar cu indicii sus: $\boldsymbol{a}^1, \boldsymbol{a}^2, \boldsymbol{a}^3$, numindu-i *vectori contravarianți ai bazei*, sau *vectorii bazei rețelei reciproce*. Acești vectori sînt definiți ca soluție a următorului sistem de 9 ecuații liniare, care îi leagă de vectorii obișnuiți, sau vectorii covarianți ai bazei (aici și în continuare, produsul scalar va fi notat cu punct ($\cdot$), iar produsul vectorial cu semnul „ori" ($\times$))

$$\begin{array}{lll} \boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}^1 = 1, & \boldsymbol{a}_2 \cdot \boldsymbol{a}^1 = 0, & \boldsymbol{a}_3 \cdot \boldsymbol{a}^1 = 0, \\ \boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}^2 = 0, & \boldsymbol{a}_2 \cdot \boldsymbol{a}^2 = 1, & \boldsymbol{a}_3 \cdot \boldsymbol{a}^2 = 0, \\ \boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}^3 = 0, & \boldsymbol{a}_2 \cdot \boldsymbol{a}^3 = 0, & \boldsymbol{a}_3 \cdot \boldsymbol{a}^3 = 1. \end{array}$$

Dacă introducem simbolul lui Kronecker

$$\delta_\alpha^\beta = \begin{cases} 1 \text{ cînd } \beta = \alpha, \\ 0 \text{ cînd } \beta \neq \alpha, \end{cases} \tag{11.1}$$

atunci acest sistem de ecuații se poate scrie într-o formă concisă

$$\boldsymbol{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{a}^\beta = \delta_\alpha^\beta. \tag{11.2}$$

Sistemul (11.2) arată că orice vector contravariant al bazei (să zicem $\boldsymbol{a}^1$) este perpendicular pe ambii vectori covarianţi ai bazei, indexaţi cu celelalte cifre (în cazul de sus, vectorii $\boldsymbol{a}_2$ şi $\boldsymbol{a}_3$) şi face un unghi ascuţit cu vectorul de bază covariant de acelaşi indice (cu vectorul $\boldsymbol{a}_1$). Într-adevăr, cînd produsul scalar a doi vectori este egal cu zero, aceştia sînt perpendiculari între ei; dacă acelaşi produs este pozitiv, unghiul dintre vectori este mai mic decît unghiul drept. Deoarece vectorul $\boldsymbol{a}^1$ este perpendicular pe vectorul $\boldsymbol{a}_2$ şi pe vectorul $\boldsymbol{a}_3$, el va fi coliniar cu produsul vectorial al vectorilor $\boldsymbol{a}_2$ şi $\boldsymbol{a}_3$

$$\boldsymbol{a}^1 = m\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3,$$

unde m este un anumit număr, deocamdată necunoscut. Pentru a-l determina vom înlocui în produsul $\boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}^1$ mărimea lui $\boldsymbol{a}^1$ din expresia

$$m\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \cdot \boldsymbol{a}_3) = 1.$$

Vom ţine seama acum că volumul unei celule elementare, construită pe vectorii $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$, este egal cu

$$v = \boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3). \qquad (11.3)$$

De aici, $m = 1/v$. Calculînd în acelaşi mod pe $\boldsymbol{a}^2$ şi pe $\boldsymbol{a}^3$, obţinem

$$\boldsymbol{a}^1 = \frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{v}, \quad \boldsymbol{a}^2 = \frac{\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1}{v}, \quad \boldsymbol{a}^3 = \frac{\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2}{v}. \qquad (11.4)$$

Formulele (11.4) arată că vectorii bazei reţelei reciproce, $\boldsymbol{a}^1$, $\boldsymbol{a}^2$, $\boldsymbol{a}^3$, sînt orientaţi după normalele la planurile de coordonate ale reţelei cristaline. Lungimile lor, aşa cum se va arăta mai jos, sînt egale cu inversul distanţelor dintre planurile reţelelor de coordonate plane.

Să calculăm produsul mixt al vectorilor contravarianţi ai bazei $\boldsymbol{a}^1 \cdot (\boldsymbol{a}^2 \times \boldsymbol{a}^3)$. Aplicînd formula cunoscută, a produsului dublu vectorial,

$$(\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B}) \times \boldsymbol{C} = (\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{C}) \cdot \boldsymbol{B} - (\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{C}) \cdot \boldsymbol{A},$$

vom obţine

$$\boldsymbol{a}^2 \times \boldsymbol{a}^3 = (1/v^2)\,(\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1) \times (\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2) =$$

$$= (1/v^2)\,\{[\boldsymbol{a}_3 \cdot (\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2)]\,\boldsymbol{a}_1 - [\boldsymbol{a}_1\,(\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2)]\boldsymbol{a}_3\} = (1/v)\boldsymbol{a}_1,$$

deoarece al doilea termen este egal cu zero. Observînd apoi că

$$\boldsymbol{a}^1 \cdot \boldsymbol{a}_1 = 1,$$

găsim, în sfîrşit,

$$\boldsymbol{a}^1 \cdot (\boldsymbol{a}^2 \times \boldsymbol{a}^3) = 1/v. \tag{11.5}$$

De aici rezultă că vectorii contravarianţi ai bazei, $\boldsymbol{a}^1$, $\boldsymbol{a}^2$, $\boldsymbol{a}^3$, formează un triplet drept (deoarece produsul lor mixt este pozitiv).

Notînd că în ecuaţiile fundamentale (11.2) vectorii co- şi contravarianţi ai bazei intră absolut simetric, se pot imediat scrie, prin analogie cu (11.4), formulele care permit exprimarea vectorilor covarianţi ai bazei prin cei contravarianţi

$$\boldsymbol{a}_1 = v\,\boldsymbol{a}^2 \times \boldsymbol{a}^3, \quad \boldsymbol{a}_2 = v\,\boldsymbol{a}^3 \times \boldsymbol{a}^1, \quad \boldsymbol{a}_3 = v\,\boldsymbol{a}^1 \times \boldsymbol{a}^2 \tag{11.6}$$

(pe primul dintre ei, de fapt, l-am şi obţinut deja, cu ocazia calculării produsului mixt dintre vectorii contravarianţi ai bazei).

Vectorii fundamentali ai reţelei reciproce, adică vectorii contravarianţi ai bazei, $\boldsymbol{a}^1$, $\boldsymbol{a}^2$, $\boldsymbol{a}^3$, ca, de fapt, orice vectori, se pot descompune după baza fundamentală (covariantă), $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$,

$$\boldsymbol{a}^1 = g^{11}\boldsymbol{a}_1 + g^{12}\boldsymbol{a}_2 + g^{13}\boldsymbol{a}_3,$$
$$\boldsymbol{a}^2 = g^{21}\boldsymbol{a}_1 + g^{22}\boldsymbol{a}_2 + g^{23}\boldsymbol{a}_3,$$
$$\boldsymbol{a}^3 = g^{31}\boldsymbol{a}_1 + g^{32}\boldsymbol{a}_2 + g^{33}\boldsymbol{a}_3.$$

Numerele de la coeficienţii dezvoltării, g, nu sînt exponenţi, ci indici; primul dintre ei este numărul (indicele) vectorului ce se descompune, iar cel de al doilea, indicele vectorului după care se decompune. Aceste trei descompuneri pot fi scrise şi concis, utilizînd indici literali şi semnul sumei

$$\boldsymbol{a}^\alpha = \sum_{\beta=1}^{3} g^{\alpha\beta}\boldsymbol{a}_\beta \quad (\alpha = 1, 2, 3),$$

dar şi mai laconică este scrierea lor folosind regula de însumare a lui Einstein

$$\boldsymbol{a}^\alpha = g^{\alpha\beta}\boldsymbol{a}_\beta. \tag{11.7}$$

În această scriere, însumarea este indicată prin faptul că indicele β — indicele de însumare — apare de două ori: atît sus cît şi jos. Cînd într-un „monom" apar doi indici notaţi cu aceeaşi

literă a alfabetului grecesc, unul superior și celălalt inferior, acesta nu mai este monom, ci suma monoamelor în care indicele de însumare ia succesiv valorile 1, 2, 3; cazurile în care indicii au alte valori vor fi menționate expres.

Coeficienții descompunerii, $g^{\alpha\beta}$ se numesc *componentele contravariante ale tensorului metric.* Pentru a înțelege sensul lor, înmulțim scalar membrul din dreapta și din stînga ai egalității (11.7) cu un vector contravariant al bazei, oarecare, $\boldsymbol{a}^{\gamma}$. Ținînd cont de faptul că

$$\boldsymbol{a}_{\beta} \cdot \boldsymbol{a}^{\gamma} = \delta_{\beta}^{\gamma},$$

obținem

$$\boldsymbol{a}^{\alpha} \cdot \boldsymbol{a}^{\gamma} = g^{\alpha\gamma}. \tag{11.8}$$

Astfel, componentele contravariante ale tensorului metric sînt egale cu produsele scalare ale vectorilor contravarianți corespunzători ai bazei. Deoarece produsul scalar al vectorilor este comutativ, adică rezultatul lor nu depinde de ordinea factorilor, aceste componente nu se schimbă la permutarea indicilor

$$g^{\alpha\gamma} = g^{\gamma\alpha}. \tag{11.9}$$

Să examinăm acum descompunerea vectorilor fundamentali ai rețelei, $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$, după vectorii fundamentali ai rețelei reciproce, $\boldsymbol{a}^1$, $\boldsymbol{a}^2$, $\boldsymbol{a}^3$,

$$\boldsymbol{a}_{\alpha} = g_{\alpha\beta}\, \boldsymbol{a}^{\beta}. \tag{11.10}$$

Coeficienții acestei dezvoltări, $g_{\alpha\beta}$, se numesc *componentele covariante ale tensorului metric.* Ele sînt egale cu produsele scalare ale vectorilor fundamentali corespunzători, ai rețelei cristaline,

$$g_{\alpha\gamma} = \boldsymbol{a}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{a}_{\gamma}. \tag{11.11}$$

Este limpede că și ei rămîn neschimbați la permutarea indicilor

$$g_{\alpha\gamma} = g_{\gamma\alpha}. \qquad (11.12$$

Ansamblurile numerelor $g_{\alpha\beta}$ și $g^{\alpha\beta}$ reprezintă niște matrice: compararea egalităților (11.7) și (11.8) arată că aceste matrice sînt una inversa celeilalte. Dacă notăm $\| g_{\alpha\beta} \| = G$, atunci $\| g^{\alpha\beta} \| = G^{-1}$, fiind valabile relațiile

$$g_{\alpha\beta} g^{\beta\gamma} = \delta_{\alpha}^{\gamma}. \tag{11.13}$$

Din formulele (11.11) rezultă că componentele covariante ale tensorului metric, $g_{\alpha\beta}$, sînt complet determinate de parametrii celulei — lungimile muchiilor şi unghiurile dintre muchii. Dacă notăm lungimile muchiilor cu a, b, c, iar unghiurile dintre ele cu α, β, γ (v. fig. 1.7), atunci

$$G = \begin{Vmatrix} a^2 & ab \cos\gamma & ca \cos\beta \\ ab \cos\gamma & b^2 & bc \cos\alpha \\ ca \cos\gamma & bc \cos\alpha & c^2 \end{Vmatrix}. \quad (11.14)$$

Apoi, cunoscînd componentele covariante ale tensorului metric, nu este prea greu să calculăm parametrii celulei

$$a = \sqrt{g_{11}}, \quad b = \sqrt{g_{22}}, \quad c = \sqrt{g_{33}},$$

$$\alpha = \arccos \frac{g_{23}}{\sqrt{g_{22} g_{33}}}, \qquad \beta = \arccos \frac{g_{31}}{\sqrt{g_{33}\, g_{11}}}, \quad (11.15)$$

$$\gamma = \arccos \frac{g_{12}}{\sqrt{g_{11}\, g_{22}}}.$$

După cum s-a demonstrat în § 15, volumul celulei elementare este

$$v = \sqrt{\det G^{-1}};$$

comparînd această egalitate cu (11.14), obţinem

$$v = abc\,\omega,$$

$$\omega = \sqrt{1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}. \quad (11.16)$$

Componentele contravariante ale tensorului metric constituie matricea

$$G^{-1} = \begin{Vmatrix} a^{*2} & a^*b^* \cos\gamma^* & c^*a^* \cos\beta^* \\ a^*b^* \cos\gamma^* & b^{*2} & b^*c^* \cos\alpha^* \\ c^*a^* \cos\beta^* & b^*c^* \cos\alpha^* & c^{*2} \end{Vmatrix}, \quad (11.17)$$

în care a^*, b^*, c^* sînt lungimile muchiilor celulei reţelei reciproce, iar α^*, β^*, γ^*, unghiurile dintre ele. Aceste mărimi se calculează în funcţie de componentele contravariante ale tensorului metric,

cu ajutorul unor formule complet analoage cu (11.15), fiind legate de parametrii rețelei cristaline prin relațiile

$$a^* = \frac{\sin\alpha}{a\omega}, \quad b^* = \frac{\sin\beta}{b\omega}, \quad c^* = \frac{\sin\gamma}{c\omega}, \tag{11.18}$$

$$\cos\alpha^* = \frac{\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha}{\sin\beta\sin\gamma}, \quad \cos\beta^* = \frac{\cos\gamma\cos\alpha - \cos\beta}{\sin\gamma\sin\alpha},$$

$$\cos\gamma^* = \frac{\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma}{\sin\alpha\sin\beta}.$$

Pentru toate cele 14 rețele Bravais (cînd celula elementară a fiecăreia dintre ele se ia ca de obicei), matricele G și G^{-1} sînt date în anexa B.

Paralelipipedul construit pe vectorii contravarianți ai bazei, $\boldsymbol{a}^1$, $\boldsymbol{a}^2$, $\boldsymbol{a}^3$, se numește *celulă a rețelei reciproce*; rețeaua reciprocă este construită din astfel de paralelipipede.

Fiecărui plan al rețelei directe îi corespunde în spațiul reciproc un nod al rețelei reciproce. Unei familii infinite de planuri paralele din spațiul direct îi corespunde în spațiul reciproc o familie infinită de puncte după o direcție normală la aceste planuri. Rețeaua directă și rețeaua reciprocă sînt reciproc conjugate, avînd aceeași simetrie punctuală (grupurile lor spațiale sînt însă, în general vorbind, diferite).

Cu ajutorul rețelei reciproce se poate descrie distribuția periodică a capacității cristalului de reflectare a radiațiilor Röntgen. Ecuația fundamentală a difracției radiațiilor Röntgen în cristale (formula Wulf-Bragg — 1913) stabilește dependența dintre lungimea de undă, λ, și distanța d dintre planuri pentru seria de planuri ale rețelei, paralele cu planul de reflexie, ordinul n al spectrului de difracție, dat de această serie de planuri, și unghiul de incidență a undei pe cristal

$$2\,d\sin\theta = n\lambda. \tag{11.19}$$

Aici θ este unghiul dintre direcția radiației incidente și planul atomic.

Distanțele dintre planurile de coordonate (100), (010) și (001) sînt inversele lungimilor muchiilor celulei rețelei reciproce a^*, b^*, c^* și se determină cu ajutorul relațiilor (11.18); în cazul general

însă, distanța dintre planuri se determină cu ajutorul relației (15.30) (v. § 15).

Direcția vectorului rețelei reciproce, $\boldsymbol{r}^*$, coincide cu direcția de reflexie Röntgen pe seria de planuri paralele ale rețelei directe, iar al n-lea nod dintr-un șir al rețelei reciproce corespunde reflexiei de ordinul n pe această serie de planuri. Fiecare nod al rețelei reciproce corespunde unei direcții a fasciculului de radiații Röntgen obținut prin difracții pe seria de planuri paralele ale rețelei.

§ 12. INDEXAREA DIRECȚIILOR ȘI PLANURILOR DIN CRISTALE

În § 1 s-a arătat că pentru fiecare cristal se poate introduce un sistem cristalografic de coordonate, XYZ, construit pe vectorii bazei, $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$, care coincid cu muchiile unei celule elementare. Deoarece vectorii $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ sînt necoplanari, orice vector $\boldsymbol{l}$ poate fi reprezentat sub forma unei combinații liniare și unice a vectorilor bazei

$$\boldsymbol{l} = l^1 \boldsymbol{a}_1 + l^2 \boldsymbol{a}_2 + l^3 \boldsymbol{a}_3. \tag{12.1}$$

Mărimile l^1, l^2, l^3 se numesc componentele vectorului l relativ la baza $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$.

În notația Einstein relația devine

$$\boldsymbol{l} = l^\alpha \boldsymbol{a}_\alpha. \tag{12.2}$$

Fie ca vectorul $\boldsymbol{l} = l^\alpha \boldsymbol{a}_\alpha$, avînd componentele l^1, l^2, l^3 numere întregi, să definească o direcție cristalografică. Dacă numerele întregi l^1, l^2, l^3 au un divizor comun, n, se poate introduce un vector de aceeași direcție, însă de n ori mai mic

$$\boldsymbol{l}' = \boldsymbol{l}/n = (l^1/n)\, \boldsymbol{a}_1 + (l^2/n)\, \boldsymbol{a}_2 + (l^3/n)\, \boldsymbol{a}_3;$$

componentele lui vor fi tot numere întregi. Vom considera, de aceea, că împărțirea prin toți divizorii comuni este deja făcută. Componentele l^1, l^2 și l^3, scrise sub forma $[l^1 l^2 l^3]$, vor fi în acest caz indicii Miller ai direcției cristalografice date, adică ai oricărei drepte orientate, paralelă cu vectorul dat. Așa cum s-a arătat în § 1, indicii unui șir se scriu între paranteze pătrate; de exemplu, simbolurile axelor de coordonate se notează [110], [010], [001].

Totalitatea direcțiilor care pot fi făcute să coincidă simetric între ele, cu ajutorul unor transformări de simetrie, proprii unei

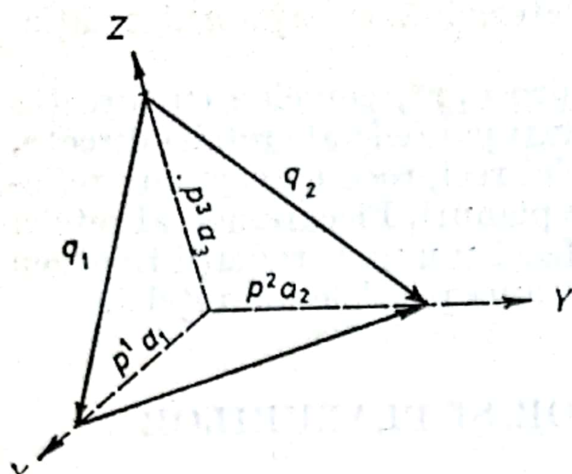


Fig. 12.1. Schemă pentru explicarea simbolului unui plan.

anumite clase de simetrie, se scriu între paranteze de genul următor ⟨ ⟩; de exemplu, totalitatea muchiilor cubului este reprezentată prin ⟨100⟩, a diagonalelor cubului prin ⟨111⟩, a diagonalelor fețelor cubului prin ⟨110⟩. Dacă unele dintre cantitățile l^α sînt negative, semnul minus se scrie deasupra lor; de pildă, direcția $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ (se citește : unu, minus unu, zero). Cînd printre indicii Miller se întîlnesc numere mai mari ca 9, pentru înlăturarea confuziilor, indicii se separă între ei prin puncte; practic însă asemenea direcții cristalografice se întîlnesc extrem de rar.

Dacă celula elementară nu este primitivă, atunci nu orice vector dus din originea axelor de coordonate pînă la un nod al rețelei va avea componentele numere întregi, însă, pentru orice direcție cristalografică poate fi găsit un vector care o definește și ale cărui componente să fie numere întregi; simbolul nodului din centrul unei celule elementare este [[1/2 1/2 1/2]], însă șirul care trece prin el (diagonala spațială a cubului) poate fi caracterizat prin simbolul [111], dat fiind că el trece prin nodul [[111]].

Orice set de planuri paralele este natural să fie caracterizat prin vectorul normal la ele; dacă acestea sînt planuri cristalografice, adică dacă conțin cel puțin trei noduri ale rețelei cristalografice, necoliniare, ar fi convenabil ca ele să fie caracterizate printr-un vector cu componente numere întregi. Din mulțimea de planuri cristalografice paralele vom alege un plan oarecare, care intersectează axele cristalografice în nodurile rețelei cristaline fără să treacă însă prin originea axelor de coordonate. Poziția planului este determinată univoc prin segmentele numere întregi tăiate de acesta pe axele de coordonate cristalografice (fig. 12.1). Sînt posibile trei cazuri :

1) să existe trei asemenea tăieturi — planul nu este paralel cu nici o axă de coordonate;

2) planul să fie paralel cu una dintre axele de coordonate; el determină două tăieturi numere întregi, pe celelalte două axe;

3) planul să fie paralel cu două axe de coordonate — segmentul este tăiat numai pe a treia axă.

Să examinăm primul caz. Vectorii

$$\boldsymbol{p}_{(1)} = p^1\boldsymbol{a}_1, \ \boldsymbol{p}_{(2)} = p^2\boldsymbol{a}_2, \ \boldsymbol{p}_{(3)} = p^3\boldsymbol{a}_3, \tag{12.3}$$

care unesc originea axelor de coordonate cu punctele de intersecţie ale planului cu axele, sînt numere întregi. Vectorii

$$\boldsymbol{q}_{(1)} = \boldsymbol{p}_{(1)} - \boldsymbol{p}_{(3)} \text{ şi } \ \boldsymbol{q}_{(2)} = \boldsymbol{p}_{(2)} - \boldsymbol{p}_{(3)} \tag{12.4}$$

sînt, de asemenea, numere întregi ; ei se află n planul cristalografic care ne interesează pe noi, produsul lor vectorial fiind perpendicular pe el. Este convenabil să-l împărţim la volumul celulei elementare, v, ceea ce nu-i va schimba, desigur, direcţia, iar ordinea factorilor produsului s-o luăm astfel încît acesta să constituie normala exterioară a feţei (presupunînd că originea axelor de coordonate se află în interiorul cristalului).

Prin urmare, o faţă este caracterizată prin vectorul normal pe ea

$$\boldsymbol{n} = \frac{1}{v}(\boldsymbol{q}_{(1)} - \boldsymbol{q}_{(2)}). \tag{12.5}$$

Să-l calculăm. Substituind în (12.5) expresiile pentru $\boldsymbol{q}_{(1)}$ şi $\boldsymbol{q}_{(2)}$ din (12.4) şi apoi înlocuind vectorii $\boldsymbol{p}_{(1)}$, $\boldsymbol{p}_{(2)}$ şi $\boldsymbol{p}_{(3)}$ cu expresiile lor, (12.3), obţinem

$$\boldsymbol{n} = \frac{1}{v}(p^1\boldsymbol{a}_1 - p^3\boldsymbol{a}_3) \times (p^2\boldsymbol{a}_2 - p^3\boldsymbol{a}_3).$$

Scriem produsul vectorial dezvoltat

$$\boldsymbol{n} = \frac{1}{v}(p^1p^2\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2 + p^3p^1\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1 + p^2p^3\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3).$$

Remarcăm acum că dacă se împart fiecare dintre termenii produsului vectorial al vectorilor bazei la v, se obţin vectorii bazei reţelei reciproce

$$\boldsymbol{n} = p^2p^3\boldsymbol{a}^1 + p^3p^1\boldsymbol{a}^2 + p^1p^2\boldsymbol{a}^3. \tag{12.6}$$

Notînd

$$n_1 = p^2p^3, \ n_2 = p^3p^1, \ n_3 = p^1p^2,$$

obţinem în final

$$n = n_1 a^1 + n_2 a^2 + n_3 a^3 = n_\alpha a^\alpha. \quad (12.7)$$

Numerele n_1, n_2, n_3 sînt componentele vectorului $\boldsymbol{n}$ în raport cu baza reciprocă, $\boldsymbol{a}^1$, $\boldsymbol{a}^2$, $\boldsymbol{a}^3$. Ca produse ale unor numere întregi ele sînt tot întregi.

Să examinăm acum cel de al doilea caz. Fie, de exemplu, un plan cristalografic paralel cu axa X, iar nodurile reţelei în care el intersectează axele Y şi Z au vectorii de poziţie exprimaţi prin numere întregi

$$\boldsymbol{p}_{(2)} = p^{(2)}\boldsymbol{a}_2, \quad \boldsymbol{p}_{(3)} = p^{(3)}\boldsymbol{a}_3. \quad (12.8)$$

Atunci planul este paralel cu vectorii $\boldsymbol{a}_{(1)}$ şi $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{p}_{(2)} - \boldsymbol{p}_{(3)}$, iar vectorul normalei la acest plan poate fi definit cu ajutorul formulei

$$\boldsymbol{n} = \frac{1}{v}\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{q}. \quad (12.9)$$

Efectuînd aceleaşi calcule ca şi în primul caz, găsim

$$\boldsymbol{n} = p^{(3)}\boldsymbol{a}^{(2)} + p^{(2)}\boldsymbol{a}^{(3)} \quad (12.10)$$

şi de data aceasta se poate scrie

$$\boldsymbol{n} = n_\alpha \boldsymbol{a}^\alpha,$$

unde

$$n_1 = 0, \quad n_2 = p^{(3)}, \quad n_3 = p^{(2)}. \quad (12.11)$$

În sfîrşit, să examinăm un plan cristalografic paralel cu axele X şi Y şi care intersectează axa Z în partea ei pozitivă. Deoarece planul este paralel cu vectorii $\boldsymbol{a}_1$ şi $\boldsymbol{a}_2$ se poate scrie imediat

$$\boldsymbol{n} = \frac{1}{v}\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2 = \boldsymbol{a}^3. \quad (12.12)$$

În expresia

$$\boldsymbol{n} = n_\alpha \boldsymbol{a}^\alpha, \quad n_1 = n_2 = 0, \quad n_3 = 1$$

(dacă planul ar fi intersectat axa Z în jumătatea ei negativă, ar fi trebuit să punem factorii în ordine inversă; atunci $\boldsymbol{n} = -\boldsymbol{a}^3$ şi, respectiv, $n_3 = -1$).

Prin urmare, un vector normal la o faţă posibilă sau reală a unui cristal poate fi luat în toate cazurile astfel încît el să aibă componentele întregi în raport cu baza reţelei reciproce. Aceste componente sînt tocmai *indicii Miller ai unei feţe* (v. § 1); ei se notează ca şi indicii unei direcţii (ai unei muchii), însă nu între paranteze pătrate, ci între paranteze obişnuite $(n_1n_2n_3)$. Dacă ei au un factor comun, trebuie împărţiţi prin acesta (în problemele de analiză structurală röntgenografică nu este totdeauna admis). Cei trei indici între paranteze obişnuite se numesc *indicii feţei*.

Indicii Miller ai unei feţe sînt invers proporţionali cu componentele vectorilor duşi din originea axelor de coordonate în punctele de intersecţie ale feţei cu axele de coordonate. Într-adevăr, faţa dată intersectîndu-se cu toate cele trei axe, din (12.6) rezultă

$$n_1 : n_2 : n_3 = \frac{1}{p^{(1)}} : \frac{1}{p^{(2)}} : \frac{1}{p^{(3)}}. \tag{12.13}$$

iar cînd se intersectează numai cu două dintre axe, să zicem Y şi Z, din (12.11) rezultă

$$n_2 : n_3 = \frac{1}{p^{(2)}} : \frac{1}{p^{(3)}}. \tag{12.14}$$

Planurile de coordonate sînt caracterizate prin simbolurile: (100) — YOZ, (010) — ZOX, (001) — XOY.

Prin urmare, s-au introdus două baze vectoriale: baza reţelei, $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$, şi baza reţelei reciproce, $\boldsymbol{a}^1$, $\boldsymbol{a}^2$, $\boldsymbol{a}^3$. S-a arătat că vectorul $\boldsymbol{l}$, care caracterizează o direcţie cristalografică, se poate alege astfel încît componentele lui, l^1, l^2, l^3, în raport cu baza reţelei să fie numere întregi, iar vectorul normal la planul cristalografic, $\boldsymbol{n}$, astfel încît componentele lui în raport cu baza reţelei reciproce, n_1, n_2, n_3, să fie tot numere întregi. Desigur, vectorul $\boldsymbol{l}$ se poate descompune după vectorii bazei reţelei reciproce, iar vectorul $\boldsymbol{n}$ după vectorii bazei directe, pierzîndu-se însă în acest caz caracterul de număr întreg al componentelor şi, totodată, valoarea cristalografică a direcţiei sau planului dat. Aşadar, este necesară o anumită pricepere în alegerea bazei, astfel încît să fie convenabilă pentru descrierea obiectului cristalografic.

Demonstrînd că indicii Miller sînt numere întregi pentru planurile cristalografice, am plecat de la conceptul de reţea cristalină. Pînă la apariţia analizei structurale röntgenografice şi demonstrarea experimentală a caracterului discret al structurii cristalelor, notarea cu indici a feţelor cristalelor s-a bazat pe legea parametrilor raţionali (legea raporturilor numerelor raţionale întregi), formulată de Haüy, în anul 1781. Împreună cu legea con-

stanței unghiurilor, legea lui Haüy este o lege empirică fundamentală a cristalografiei; ea stabilește legile aranjării fețelor poliedrelor cristaline și explică de ce la cristale apare un anumit fel de fețe.

Legea parametrilor raționali se enunță în modul următor: raporturile duble ale tăieturilor făcute pe cele trei muchii ale unii cristal, luate drept axe de coordonate, dintre a) orice față a cristalului și b) nici una dintre fețele lui, considerată ca față unitară, sînt egale cu raporturi de numere întregi mici.

Să alegem într-un poliedru cristalin trei fețe neparalele și să le considerăm planuri de coordonate, iar muchiile după care se intersectează aceste fețe, axe de coordonate. Să mai luăm încă o față, așa-numită față *unitară*. Fața unitară, neparalelă cu nici una dintre fețele de coordonate, determină pe axele de coordonate tăieturile OA, OB, OC, așa-numiții *parametri ai feței*. Conform legii parametrilor raționali, pentru orice altă față a cristalului, care dă pe axele de coordonate tăieturile OA', OB', OC', raportul dublu este egal cu

$$\frac{OA}{OA'}:\frac{OB}{OB'}:\frac{OC}{OC'} = m : n : p, \qquad (12.15)$$

unde m, n, p sînt numere întregi, în majoritatea covîrșitoare a cazurilor nedepășind numărul 5. Fețele al căror raport dublu al parametrilor este irațional sînt imposibile pentru un cristal. Dacă raporturile dintre parametri sînt două cîte două simple și întregi, fiind însă numere mari (mai mari ca 5), atunci fața este posibilă, însă extrem de puțin probabilă.

Pentru cristalografie, legea lui Haüy are aceeași valoare ca legea lui Dalton, a raporturilor multiple pentru chimie. Conform legii lui Dalton, nu sînt posibile orice combinații chimice ale elementelor, ci numai acele combinații în care elementele se află în raporturi de numere întregi. Conform legii numerelor întregi, a lui Haüy, pe un poliedru cristalin nu sînt posibile orice fețe, ci numai acele fețe pentru care raporturile duble ale tăieturilor făcute de o față dată și o anumită față „unitară", sînt egale cu raporturi de numere întregi, mici.

Cu toate că legea parametrilor raționali a fost stabilită numai pe baza analizei formelor exterioare, ale cristalelor și în vremea în care nu existau încă decît cele mai nebuloase ipoteze asupra structurii cristalelor, cu un sfert de secol înaintea formulării legii lui Dalton, ea a fost, în fond, prima lege numerică, care definea structura atomo-moleculară a substanței.

Într-adevăr, ideea legii parametrilor raționali este ușor și simplu de explicat acum, cînd se cunoaște că particulele dintr-un

cristal sînt distribuite în şiruri regulate, care se supun anumitor legi şi că orice muchie a unui cristal corespunde unui şir de particule din reţea. Dacă trei muchii oarecare ale cristalului sînt luate drept axe de coordonate, acest fapt este echivalent cu alegerea drept axe de coordonate a trei translaţii necoplanare din reţea. Deoarece orice faţă a unui cristal corespunde unei structuri reticulare, plane, de noduri ale unei reţele, ea va trebui să treacă şi prin nodurile care se află pe axele X, Y, Z.

În fond, sensul legii lui Haüy se reduce la faptul că feţele unui cristal corespund totdeauna unei reţele plane a reţelei cristaline, iar muchiile cristalului corespund totdeauna unui şir de noduri ale reţelei. Totodată, de regulă, feţele reale ale unui cristal corespund unor reţele plane cu cea mai mare densitate reticulară — prin aceasta explicîndu-se faptul că indicii feţei nu numai că sînt numere întregi, dar sînt şi mici.

O asemenea interpretare a acestei legi este uşor de dat acum, cînd structura reticulară a cristalelor a fost stabilită experimental şi este bine cunoscută. Cronologic însă a fost străbătut un drum extrem de dificil şi anume, de la observarea formelor exterioare ale poliedrelor cristaline, de la măsurarea unghiurilor de îmbinare a feţelor cristalelor între ele, la primele supoziţii asupra structurii periodice a cristalelor, la teoriile abstracte ale structurii cristalelor, abia ulterior confirmate experimental. Primele reprezentări asupra structurii ordonate a cristalelor au fost emise tocmai în legătură cu legea raporturilor numerelor întregi. Studiul formei poliedrice simetrice a cristalelor a dus la înţelegerea comensurabilităţii interne a structurii lor.

Legea parametrilor raţionali rămîne valabilă chiar dacă axele de coordonate luate după muchiile poliedrului cristalin nu corespund muchiilor celulei elementare. Oricum, aceste muchii trebuie să fie paralele cu nişte şiruri oarecare de puncte ale reţelei, distanţa dintre ele fiind inevitabil împărţită în segmente egale de către sistemele de planuri paralele, cu care sînt paralele fiecare dintre feţele cristalului.

Din legea parametrilor raţionali rezultă, în particular, că orice faţă a unui cristal şi orice plan reticular din reţeaua cristalină pot fi definite prin trei numere întregi, mici, dacă drept axe de coordonate se aleg direcţiile a trei muchii ale cristalului, iar ca unităţi de măsură pe aceste axe se iau segmentele pe care le taie pe aceste axe una dintre feţele cristalului.

În principiu, cu ajutorul indicilor Miller pot fi definite planurile şi direcţiile cristalografice din orice cristale. Cristalografii nu utilizează însă indicii Miller raportaţi la sistemul hexagonal de coordonate, ci preferă indicii Bravais (pentru descrierea cristalelor din sistemul trigonal, uneori se utilizează şi indicii Miller, însă

8—c. 292

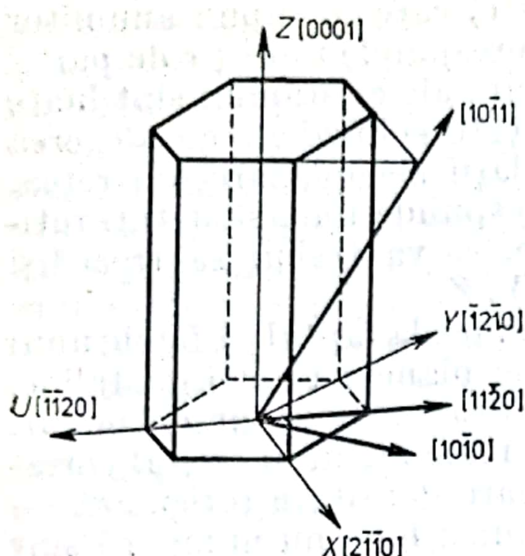


Fig. 12.2. Simbolurile direcţiilor principale dintr-o celulă hexagonală.

raportaţi nu la sistemul hexagonal, ci la sistemul de coordonate romboedric — vezi § 13). Aceasta se explică prin tendinţa de a caracteriza planurile şi direcţiile simetric echivalente folosind un set de indici, într-un anumit sens „asemănători", pe cînd indicii Miller, raportaţi la un sistem de coordonate hexagonal nu posedă această proprietate. Astfel, vectorii $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$ şi $-\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2$ definesc direcţii simetric echivalente, pe cînd indicii Miller ai două dintre ele, [100] şi [010], se deosebesc esenţial de indicii Miller ai celei de a treia direcţii, $[\bar{1}\bar{1}0]$.

Pentru a pune complet în evidenţă simetria cristalelor singoniei hexagonale, se utilizează un sistem de coordonate cu patru axe : în planul de bază, suplimentar faţă de axele X şi Y, orientate după $\boldsymbol{a}_1$ şi, respectiv, $\boldsymbol{a}_2$, se introduce încă o axă, U, orientată după vectorul $-\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2$. După axa de simetrie principală este orientat ca şi pînă acum vectorul $\boldsymbol{a}_3$ şi deci şi axa Z (fig. 12.2). Planurile şi direcţiile cristalografice sînt caracterizate acum prin orientarea faţă de toate cele patru axe şi, corespunzător acestora, prin patru indici, care se numesc *indici Bravais*. Suma primilor trei indici Bravais este totdeauna egală cu zero.

Indicii Bravais ai unei direcţii cristalografice, l, sînt tocmai coeficienţii descompunerii vectorului $\boldsymbol{l}$ după cei patru vectori, $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $-\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$, cu condiţia ca suma primilor trei coeficienţi să fie egală cu zero. Din această definiţie rezultă procedeul de trecere de la scrierea vectorială obişnuită la indicii Bravais. Vectorul unei direcţii cristalografice,

$$\boldsymbol{l} = l^1\boldsymbol{a}_1 + l^2\boldsymbol{a}_2 + l^3\boldsymbol{a}_3 \tag{12.16}$$

(l^1, l^2, l^3 fiind numere întregi) poate fi scris sub forma

$$\boldsymbol{l} = l^1\boldsymbol{a}_1 + l^2\boldsymbol{a}_2 + 0\,(-\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2) + l^3\boldsymbol{a}_3.$$

Numerele l^1, l^2, 0, l^3 se deosebesc de indicii Bravais numai prin faptul că suma primelor trei numere nu este egală cu zero. Să adăugăm la vectorul $\boldsymbol{l}$ vectorul

$$\boldsymbol{m} = m\boldsymbol{a}_1 + m\boldsymbol{a}_2 + m(-\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2) = 0.$$

Evident,

$$\boldsymbol{l} + \boldsymbol{m} = (l^1 + m)\,\boldsymbol{a}_1 + (l^2 + m)\,\boldsymbol{a}_2 + m(-\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2) + l^3\boldsymbol{a}_3 = \boldsymbol{l}.$$

Să punem

$$m = -(l^1 + l^2)/3,$$

atunci suma primilor trei indici devine, aşa cum se şi cere, egală cu zero. Pentru ca indicii să fie numere întregi, înmulţim toţi coeficienţii cu 3. Prin urmare, pentru direcţia cristalografică

$$\boldsymbol{l} = l^1\boldsymbol{a}_1 + l^2\boldsymbol{a}_2 + l^3\boldsymbol{a}_3$$

indicii Bravais sînt egali cu

$$[2l^1 - l^2.\ 2l^2 - l^1.\ -l^1 - l^2.\ 3l^3]. \qquad (12.17)$$

Dacă se constată că indicii Bravais obţinuţi au un factor comun, fireşte trebuie simplificaţi prin acesta. Avînd daţi indicii Bravais $[r^1r^2r^3r^4]$ ai unei direcţii cristalografice este uşor acum de găsit vectorul $\boldsymbol{l}$, care o caracterizează. Din definiţia indicilor Bravais,

$$\boldsymbol{l} = r^1\boldsymbol{a}_1 + r^2\boldsymbol{a}_2 + r^3(-\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2) + r^4\boldsymbol{a}_3.$$

Reducînd termenii asemenea, obţinem

$$\boldsymbol{l} = (r^1 - r^3)\,\boldsymbol{a}_1 + (r^2 - r^3)\,\boldsymbol{a}_2 + r^4\boldsymbol{a}_3 \qquad (12.18)$$

care este tocmai soluţia problemei enunţate.

Indicii Bravais pentru direcţii simetric echivalente sînt, întradevăr, asemănători. De exemplu, axele X, Y şi U sînt caracterizate, respectiv, prin simbolurile $[2\bar{1}\bar{1}0]$, $[\bar{1}2\bar{1}0]$ şi $[\bar{1}\bar{1}20]$; ele se deosebesc unul de altul numai prin ordinea indicilor (v. fig. 12.2).

Indicii Bravais pentru planurile cristalografice reprezintă coeficienţii descompunerii vectorului normalei $\boldsymbol{n}$ la planul cristalografic, după cei patru vectori

$$\frac{2}{3}\boldsymbol{a}^1 - \frac{1}{3}\boldsymbol{a}^2,\quad \frac{2}{3}\boldsymbol{a}^2 - \frac{1}{3}\boldsymbol{a}^1,\quad -\frac{1}{3}\boldsymbol{a}^1 - \frac{1}{3}\boldsymbol{a}^2,\ \boldsymbol{a}^3, \qquad (12.19)$$

iar suma primilor trei coeficienţi este egală cu zero. Pentru un plan caracterizat prin vectorul

$$\boldsymbol{n} = n_1 \boldsymbol{a}^1 + n_2 \boldsymbol{a}^2 + n_3 \boldsymbol{a}^3, \tag{12.20}$$

indicii Bravais sînt

$$(n_1 . n_2 . - n_1 - n_2 . n_3). \tag{12.21}$$

Dimpotrivă, planul cristalografic avînd indicii Bravais

$$(p_1 p_2 p_3 p_4)$$

este caracterizat de vectorul

$$\boldsymbol{n} = p_1 \boldsymbol{a}^1 + p_2 \boldsymbol{a}^2 + p_4 \boldsymbol{a}^3. \tag{12.22}$$

Conform definiţiei unanim acceptate în cristalografie, indicii Bravais ai planurilor cristalografice sînt numere întregi prime între ele, invers proporţionale cu tăieturile planului dat pe fiecare dintre axele X, Y, U, Z, măsurate în aceleaşi unităţi cu axele. Este deci necesar să se demonstreze că atît definiţia formală, dată mai sus, pentru indicii Bravais, cît şi definiţia unanim acceptată, prezentată aici, sînt echivalente.

După cum rezultă din teorema generală, dedusă la începutul acestui paragraf, componentele n_1, n_2, n_3 ale vectorului $\boldsymbol{n}$ sînt invers proporţionale cu segmentele tăiate de planul dat pe axele X, Y şi Z. Aceste componente sînt însă egale, respectiv, cu primul, al doilea şi al patrulea dintre indicii Bravais. Pe urmă, dacă un plan dat are ca tăieturi pe axele X şi Y segmentele d/n_1 şi, respectiv, d/n_2, atunci segmentul tăiat de el pe axa U va fi egal cu $d/(-n_1 - n_2)$. Într-adevăr, să examinăm figura 12.3. Dreapta MN este linia de intersecţie a planului bazei cu planul definit de vectorul $\boldsymbol{n}$. Planul $\boldsymbol{n}$ intersectează axele X, Y şi U în punctele A, B, C, care se află pe această dreaptă. Evident,

$$OA = \frac{d}{n_1}$$

şi

$$OB = \frac{d}{n_2}.$$

Pe axa U este tăiat segmentul OC. Să ducem segmentele $CA' \parallel OB$ şi $CB' \parallel OA$. Deoarece

$$\angle AOC = \angle BOC = 60°,$$

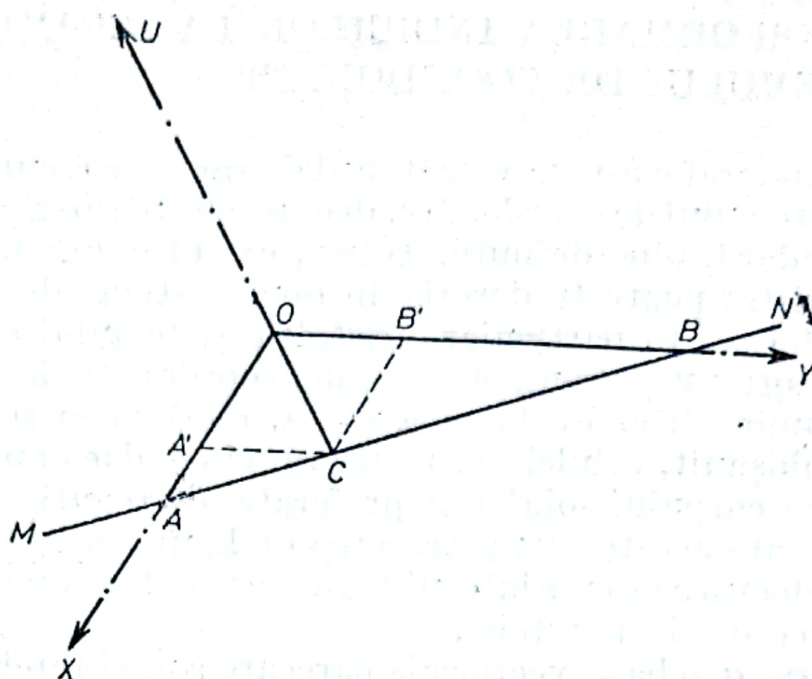


Fig.12.3. Schemă pentru demonstrarea teoremei referitoare la faptul că indicii Bravais ai unui plan sînt proporţionali cu segmentele tăiate de acest plan pe axele X, Y, Z şi U.

evident că triunghiurile OCA' şi OCB' sînt echilaterale. Acum, folosind asemănarea dintre triunghiurile $A'CA$ şi $B'CA$ să scriem proporţia

$$\frac{A'C}{A'A} = \frac{B'B}{B'C},$$

sau

$$\frac{OC}{d/n_1 - OC} = \frac{d/n_2 - OC}{OC},$$

din care obţinem

$$-OC = -\frac{(d/n_1)\,(d/n_2)}{d/n_1 + d/n_2} = \frac{d}{-n_1 - n_2}, \qquad (12.23)$$

ceea ce trebuia demonstrat.

În tabelul 13.1 (§ 13), pentru cele mai des folosite direcţii şi planuri, sînt daţi indicii Bravais şi indicii Miller, raportaţi la sistemul de coordonate hexagonal (adică coeficienţii l^α ai descompunerii vectorului unei direcţii cristalografice, $\boldsymbol{l} = l^\alpha \boldsymbol{a}_\alpha$, după vectorii bazei, $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$, ai reţelei hexagonale, şi coeficienţii n_β ai descompunerii vectorului normalei la planul cristalografic, $\boldsymbol{n} = n_\beta \boldsymbol{a}^\beta$ după vectorii bazei, $\boldsymbol{a}^1$, $\boldsymbol{a}^2$, $\boldsymbol{a}^3$, ai reţelei reciproce).

§ 13. TRANSFORMAREA INDICILOR LA SCHIMBAREA SISTEMULUI DE COORDONATE

În cristalografie este nevoie destul de rar să se recurgă la transformarea sistemului de coordonate, deoarece se utilizează, de obicei, sisteme standard, bine definite. Totuși, există cazuri în care unul și același cristal poate fi descris în două sisteme de coordonate standard diferite. În particular, cristalele sistemului trigonal sînt descrise uneori nu într-un sistem de coordonate hexagonal, ci într-unul romboedric. Pe lîngă aceasta, dacă în cristalografie se utilizează, obișnuit, celulele elementare, chiar dacă nu sînt primitive, în fizica corpului solid sînt preferate, de regulă, celulele primitive. În toate aceste cazuri trecerea de la un mijloc de descriere la altul se efectuează cu ajutorul transformărilor corespunzătoare ale bazei vectoriale a rețelei.

Fie $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ o bază vectorială oarecare a unei rețele cristaline. O vom numi convențional bază „veche'' și să considerăm, totodată, o altă bază a rețelei, $\boldsymbol{a}_{1'}$, $\boldsymbol{a}_{2'}$, $\boldsymbol{a}_{3'}$, pe care o vom denumi (tot convențional) bază „nouă''. Corespunzător vom denumi și sistemele de coordonate construite pe aceste baze, „vechi'' și „noi''. Cunoscînd componentele unui vector oarecare în sistemul de coordonate vechi, se pot calcula componentele lui din sistemul nou ; această operație, aplicată tuturor vectorilor care figurează în problema de rezolvat, a căpătat numele de *transformare a sistemului de coordonate,* sau trecere de la sistemul de coordonate vechi la cel nou.

Vectorii noii baze se pot descompune, ca orice vector, după baza veche

$$\boldsymbol{a}_{\beta'} = P^{\alpha}_{\beta'}\boldsymbol{a}_{\alpha}. \tag{13.1}$$

Dacă vectorii bazei vechi definesc o celulă elementară, atunci toți coeficienții $P^{\alpha}_{\beta'}$ sînt numere întregi. Dacă însă paralelipipedul construit pe vectorii bazei vechi nu este elementar, coeficienții $P^{\alpha}_{\beta'}$ nu sînt obligatoriu numere întregi (fiind, în orice caz, raționali).

Deoarece nici vectorii bazei noi nu sînt coplanari, vectorii bazei vechi se pot descompune după noua bază

$$\boldsymbol{a}_{\alpha} = Q^{\gamma'}_{\alpha}\boldsymbol{a}_{\gamma'}. \tag{13.2}$$

Pentru a stabili relațiile care leagă coeficienții $Q^{\gamma'}_{\alpha}$ de coeficienții $P^{\alpha}_{\beta'}$, să substituim expresia (13.2) pentru $\boldsymbol{a}_{\alpha}$ în formula (13.1)

$$\boldsymbol{a}_{\beta'} = P^{\alpha}_{\beta'}\, Q^{\gamma'}_{\alpha}\boldsymbol{a}_{\gamma'}.$$

Fiindcă vectorii fundamentali sînt liniar independenţi, din ultima egalitate rezultă

$$P^{\alpha}_{\beta'}\, Q^{\gamma'}_{\alpha} = \delta^{\gamma'}_{\beta'}. \tag{13.3}$$

Însă se poate proceda şi altfel: să înlocuim expresia (13.1) a lui $\boldsymbol{a}_{\beta'}$ în formula (13.2). Obţinem drept rezultat egalitatea

$$\boldsymbol{a}_{\gamma} = Q^{\beta'}_{\gamma} P^{\alpha}_{\beta'} \boldsymbol{a}_{\alpha}.$$

În virtutea independenţei liniare a vectorilor bazei, rezultă

$$Q^{\beta'}_{\gamma} P^{\alpha}_{\beta'} = \delta^{\alpha}_{\gamma}. \tag{13.4}$$

Seturile de coeficienţi $P^{\alpha}_{\beta'}$ şi $Q^{\beta'}_{\alpha}$ formează următoarele matrice pătratice

$$P = \begin{Vmatrix} P^1_{1'} & P^2_{1'} & P^3_{1'} \\ P^1_{2'} & P^2_{2'} & P^3_{2'} \\ P^1_{3'} & P^2_{3'} & P^3_{3'} \end{Vmatrix}, \quad Q = \begin{Vmatrix} Q^{1'}_1 & Q^{2'}_1 & Q^{3'}_1 \\ Q^{1'}_2 & Q^{2'}_2 & Q^{3'}_2 \\ Q^{1'}_3 & Q^{2'}_3 & Q^{3'}_3 \end{Vmatrix}.$$

Relaţiile (13.3) şi (13.4) pot fi scrise sub formă de egalităţi matriceale

$$PQ = I, \quad QP = I. \tag{13.5}$$

Aici

$$I = \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix} \tag{13.6}$$

este *matricea unitate*.

Dacă cele două matrice satisfac una dintre relaţiile (13.5), ele satisfac în mod necesar şi pe cea de-a doua. Astfel de matrice se numesc *matrice inverse*. Cunoscînd una dintre cele două matrice inverse, să zicem P, se pot obţine suficient de simplu elementele celeilalte. Pentru aceasta, trebuie calculat determinantul $\det P$ al matricei P şi complementele algebrice, $\Pi^{\beta'}_{\alpha}$, ale elementelor ei. Complementul algebric $\Pi^{\beta'}_{\alpha}$ al elementului $P^{\alpha}_{\beta'}$ al matricei P este egal cu determinantul obţinut din determinantul matricei P, prin eliminarea coloanei şi liniei care conţin elementul $P^{\alpha}_{\beta'}$ şi avînd semnul $(-1)^{\alpha+\beta'}$. Apoi, elementele $Q^{\beta'}_{\alpha}$ ale matricei Q se calculează cu ajutorul formulei

$$Q^{\beta'}_{\alpha} = \frac{1}{\det P}\, \Pi^{\beta'}_{\alpha}. \tag{13.7}$$

Să introducem simbolurile Levi-Civita

$$\delta_{\alpha\beta\gamma} = \begin{cases} 1 \text{ pentru } \alpha\beta\gamma = 123,\ 231,\ 312, \\ -1 \text{ pentru } \alpha\beta\gamma = 132,\ 213,\ 321, \\ 0 \text{ în celelalte cazuri*} \end{cases} \qquad (13.8)$$

şi $\delta^{\alpha\beta\gamma}$, care se deosebeşte de precedentul numai prin scrierea indicilor sus. Cu ajutorul simbolurilor introduse, relaţiile (11.4) şi (11.6) dintre vectorii bazei reţelei directe şi ai celei reciproce se scriu într-o formă concisă şi elegantă

$$\boldsymbol{a}^{\alpha} = \frac{1}{2v}\,\delta^{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{a}_{\beta} \times \boldsymbol{a}_{\gamma},$$

$$\boldsymbol{a}_{\alpha} = \frac{1}{2}\,v\,\delta_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{a}^{\beta} \times \boldsymbol{a}^{\gamma}, \qquad (13.9)$$

la fel şi formulele pentru produsele vectoriale ale vectorilor bazei

$$\boldsymbol{a}_{\alpha} \times \boldsymbol{a}_{\beta} = v\,\delta_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{a}^{\gamma}, \quad \boldsymbol{a}^{\alpha} \times \boldsymbol{a}^{\beta} = \frac{1}{v}\,\partial^{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{a}_{\gamma}. \qquad (13.10)$$

Simbolurile Levi-Civita permit scrierea foarte concisă a succesiunii operaţiilor necesare pentru calcularea determinantului oricărei matrice S de forma (3×3), avînd elementele $S^{\alpha}_{\varkappa}$

$$\det S = \delta_{\alpha\beta\gamma}S^{\alpha}_{1}S^{\beta}_{2}S^{\gamma}_{3} = \delta^{\alpha\beta\gamma}S^{1}_{\alpha}S^{2}_{\beta}S^{3}_{\gamma}. \qquad (13.11)$$

Utilizînd aceste formule, să calculăm volumul v' al paralelipipedului construit pe vectorii bazei noi. Evident,

$$v' = \boldsymbol{a}_{1'} \cdot (\boldsymbol{a}_{2'} \times \boldsymbol{a}_{3'}).$$

Înlocuind vectorii bazei noi cu descompunerile lor, (13.1), obţinem

$$v' = P^{\alpha}_{1'}P^{\beta}_{2'}P^{\gamma}_{3'}\boldsymbol{a}_{\alpha} \cdot (\boldsymbol{a}_{\beta} \times \boldsymbol{a}_{\gamma}). \qquad (13.12)$$

---

* Este cunoscută şi o altă formă a definirii simbolului Levi-Civita mai compactă, dar, din, păcate mai puţin intuitivă

$$\delta_{\alpha\beta\gamma} = \frac{1}{2}(\alpha - \beta)(\beta - \gamma)(\gamma - \alpha).$$

Folosind pentru calcularea produsului $\boldsymbol{a}_\beta \times \boldsymbol{a}_\gamma$ formula (13.10), şi apelînd apoi la formula (11.2), obţinem

$$v' = v\delta_{\alpha\beta\gamma}P^{\alpha}_{1'}P^{\beta}_{2'}P^{\gamma}_{3'}. \tag{13.13}$$

Comparînd această expresie cu formula (11.11), ajungem la relaţia

$$v' = v \det P. \tag{13.14}$$

Rezultă deci că determinantul matricei P este egal cu raportul dintre volumul paralelipipedului construit pe vectorii bazei noi şi volumul paralelipipedului construit pe vectorii bazei vechi. Evident,

$$\det Q = v/v'$$

(determinanţii matricelor care sînt reciproc inverse sînt reciproc inverşi).

Să examinăm acum cum se va transforma baza reţelei reciproce ca urmare a unei transformări date a bazei reţelei cristaline. Evident, noilor vectori covarianţi ai bazei, $\boldsymbol{a}_{1'}, \boldsymbol{a}_{2'}, \boldsymbol{a}_{3'}$, le corespund vectori contravarianţi ai bazei noi, $\boldsymbol{a}^{1'}$, $\boldsymbol{a}^{2'}$, $\boldsymbol{a}^{3}$, care sînt daţi de relaţiile

$$\boldsymbol{a}^{\alpha'} \cdot \boldsymbol{a}^{\gamma'} = \delta^{\gamma'}_{\alpha'}. \tag{13.15}$$

Ei se descompun după vectorii vechi, prin intermediul matricei Q

$$\boldsymbol{a}^{\gamma'} = Q^{\gamma'}_{\eta}\boldsymbol{a}^{\eta}. \tag{13.16}$$

Într-adevăr, pentru o astfel de lege de transformare,

$$\boldsymbol{a}_{\alpha'} \cdot \boldsymbol{a}^{\gamma'} = P^{\beta}_{\alpha'}Q^{\gamma'}_{\eta} \cdot \boldsymbol{a}_\beta \cdot \boldsymbol{a}^{\eta},$$

iar de aici, cu ajutorul relaţiilor (11.2) şi (13.3) se obţine imediat relaţia (13.15). Este evident că vectorii contravarianţi ai bazei vechi se vor descompune după cei noi, prin intermediul matricei

$$\boldsymbol{a}^{\eta} = P^{\eta}_{\gamma'}\boldsymbol{a}^{\gamma'}. \tag{13.17}$$

Acum este uşor de înţeles cum se transformă componentele vectorilor reţelei raportaţi la a eastă bază, în cazul unei transformări date a bazei, adică cum se transformă indicii Miller ai direcţiilor cristalografice (ai muchiilor) şi ai planurilor cristalografice

(ai fețelor). Vom analiza mai întîi indicii direcțiilor cristalografice. Pentru orice vector $\boldsymbol{l}$ este valabilă egalitatea

$$\boldsymbol{l} = l^{\alpha}\boldsymbol{a}_{\alpha} = l^{\beta'}\boldsymbol{a}_{\beta'}. \tag{13.18}$$

Pentru satisfacerea ei este necesar ca

$$l^{\beta'} = Q^{\beta'}_{\gamma} l^{\gamma}. \tag{13.19}$$

Într-adevăr, în acest caz,

$$l^{\beta'}\boldsymbol{a}_{\beta'} = Q^{\beta'}_{\gamma} l^{\gamma} P^{\alpha}_{\beta'}\boldsymbol{a}_{\alpha},$$

iar de aici, după aplicarea identității (13.4), rezultă că egalitatea (13.18) este satisfăcută în cazul acestei legi de transformare. Invers, componentele vechi, l^{α}, se pot exprima prin cele noi, prin intermediul matricei P

$$l^{\alpha} = P^{\alpha}_{\beta'} l^{\beta'}. \tag{13.20}$$

Complet analog se deduc formulele de transformare pentru indicii fețelor

$$n_{\beta'} = P^{\alpha}_{\beta'} n_{\alpha}, \tag{13.21}$$

$$n_{\alpha} = Q^{\beta'}_{\alpha} n_{\beta'}. \tag{13.22}$$

Să sintetizăm toate rezultatele obținute în acest paragraf sub forma unui tabel. În acest caz vom numi trecerea de la mărimile vechi la cele noi transformare „directă" — ea este dată de formulele care exprimă mărimile noi prin combinații liniare ale celor vechi. Trecerea de la mărimile noi la cele vechi o vom numi transformare „inversă". Vom obține atunci următorul tabel

Mărimile	Transformarea directă	Transformarea inversă
Vectorii bazei rețelei, $\boldsymbol{a}_{\alpha}$	$\boldsymbol{a}_{\beta'} = P^{\alpha}_{\beta'}\boldsymbol{a}_{\alpha}$	$\boldsymbol{a}_{\gamma} = Q^{\beta'}_{\gamma}\boldsymbol{a}_{\beta'}$
Vectorii bazei rețelei reciproce, $\boldsymbol{a}^{\alpha}$	$\boldsymbol{a}^{\beta'} = Q^{\beta'}_{\alpha}\boldsymbol{a}^{\alpha}$	$\boldsymbol{a}^{\gamma} = P^{\gamma}_{\beta'}\boldsymbol{a}^{\beta'}$
Indicii planurilor (fețelor), n_{α}	$n_{\beta'} = P^{\alpha}_{\beta'} n_{\alpha}$	$n_{\gamma} = Q^{\beta'}_{\gamma} n_{\beta'}$
Indicii direcțiilor (muchiilor), l^{α}	$l^{\beta'} = Q^{\beta'}_{\alpha} l^{\alpha}$	$l^{\gamma} = P^{\gamma}_{\beta'} l^{\beta'}$

Acest tabel arată că transformarea directă a mărimilor avînd indici inferiori — vectorii bazei rețelei, $\boldsymbol{a}_{\alpha}$, și indicii fețelor, n_{α} — se realizează prin intermediul matricei P, iar transformarea inversă,

cu ajutorul matricei Q. Din contră, în cazul mărimilor care au indicii superiori — vectorii bazei rețelei reciproce, $\boldsymbol{a}^{\alpha}$, și indicii muchiilor, l^{α} — transformarea directă este legată de matricea Q, iar cea inversă, de matricea P. Tocmai de acest fapt este legată denumirea mărimilor : mărimile cu indici inferiori se numesc mărimi covariante (vectorii covarianți ai bazei, $\boldsymbol{a}_{\alpha}$, componentele covariante, n_{α}), deoarece ele se transformă la fel ca și baza vectorială fundamentală, pe cînd mărimile cu indici superiori se numesc mărimi contravariante (vectorii contravarianți ai bazei, $\boldsymbol{a}^{\alpha}$, componentele contravariante, l^{α}), pentru că ele se transformă într-un mod, ca să zicem așa „din contră".

Denumirile componentelor tensorului metric de „covariante" și „contravariante" amintesc de legile de transformare a acestor componente la trecerea de la o bază la alta. Legile de transformare rezultă direct din formulele (11.8) și (11.11). Dacă pe lîngă baza veche, $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$, se introduce o bază nouă, $\boldsymbol{a}_{1'}$, $\boldsymbol{a}_{2'}$, $\boldsymbol{a}_{3'}$, atunci, conform expresiilor (11.11), legea de transformare a componentelor covariante ale tensorului metric este dată de relațiile

$$g_{\gamma'\eta'} = P^{\alpha}_{\gamma'} P^{\beta}_{\eta'} g_{\alpha\beta},$$

$$g_{\alpha\beta} = Q^{\gamma'}_{\alpha} Q^{\eta'}_{\beta} g_{\gamma'\eta'}. \qquad (13.23)$$

Să comparăm aceste formule cu legea de transformare a componentelor covariante ale vectorului, (13.21), (13.22). Evident, componentele covariante ale tensorului metric se transformă ca produsul componentelor covariante a doi vectori. Această proprietate se utilizează pentru definirea tensorului. Anume, nouă mărimi $f_{\alpha\beta}$ se numesc *componentele covariante ale tensorului de rangul doi*, dacă ele se transformă ca produsele componentelor covariante a doi vectori. Mai mult decît atît, 3^r mărimi $f_{\alpha_1 \ldots \alpha_r}$ se numesc *componentele covariante ale unui tensor de rangul r*, dacă ele se transformă ca produsele componentelor covariante ale r vectori.

În toate aceste afirmații se poate înlocui prefixul „co" prin prefixul „contra"; ca rezultat vom obține definițiile corespunzătoare pentru componentele contravariante ale tensorilor. În particular, din relațiile (13.8), (13.16) și (13.17) se deduce legea de transformare a componentelor contravariante ale tensorului metric

$$g^{\gamma'\eta'} = Q^{\gamma'}_{\alpha} Q^{\eta'}_{\beta} g^{\alpha\beta},$$

$$g^{\alpha\beta} = P^{\alpha}_{\gamma'} P^{\beta}_{\eta'} g^{\gamma'\eta'}. \qquad (13.24)$$

Sînt posibile, de asemenea, și componente mixte ale tensorilor; de exemplu, cele două mărimi f^{β}_{α} se numesc *componente mixte*

(mai exact, o dată covariante și o dată contravariante) *ale unui tensor de rangul doi*, dacă ele se transformă ca produsul dintre componenta covariantă a unui vector și componenta contravariantă a celuilalt vector.

S-a menționat deja (v. § 12) că, în principiu, orice vector se poate descompune atît în raport cu o bază covariantă, cît și în raport cu una contravariantă; în mod corespunzător, acest vector va fi definit prin componentele lui contravariante sau prin cele covariante. O proprietate specifică a tensorului metric constă în faptul că el determină legătura dintre componentele ambelor tipuri, permițînd o trecere imediată de la un tip la celălalt.

Fie, de exemplu, vectorul

$$\boldsymbol{l} = l^\alpha \boldsymbol{a}_\alpha$$

definit inițial prin componentele sale contravariante, l^α. Pentru a determina conponentele lui covariante, l_α, este suficient să descompunem vectorii covarianți ai bazei, $\boldsymbol{a}_\alpha$, după cei contravarianți

$$\boldsymbol{a}_\alpha = g_{\alpha\beta}\boldsymbol{a}^\beta.$$

Acum avem

$$\boldsymbol{l} = l^\alpha g_{\alpha\beta}\boldsymbol{a}^\beta.$$

Însă chiar acești coeficienți ai descompunerii vectorului $\boldsymbol{l}$ după baza contravariantă constituie tocmai componentele sale covariante, l_β. Deci, componentele covariante și cele contravariante ale unui același vector sînt legate prin relația

$$l_\beta = l^\alpha g_{\alpha\beta}. \tag{13.25}$$

Analog se deduce expresia

$$n^\beta = n_\alpha g^{\alpha\beta}, \tag{13.26}$$

care permite exprimarea componentelor contravariante ale unui vector prin componentele sale covariante. Relațiile (13.25) și (13.26) arată că cu ajutorul tensorului metric se pot ridica și coborî indicii. Dacă, în particular, folosim tensorul metric pentru a coborî unul dintre indicii componentelor contravariante chiar ale acestui tensor sau pentru a ridica unul dintre indicii componentelor sale covariante, atunci vom obține componentele mixte (o dată covariante și o dată contravariante) ale tensorului metric

$$g^\alpha_\gamma = g^{\alpha\beta}g_{\beta\gamma}.$$

Comparînd acest rezultat cu formula (11.13), vedem că

$$g^{\alpha}_{\gamma} = \delta^{\alpha}_{\gamma}, \qquad (13.27)$$

adică componentele mixte ale unui tensor metric coincid cu simbolurile Kronecker.

Ca exemplu de transformare a unui sistem de coordonate vom examina trecerea de la sistemul de coordonate romboedric la sistemul hexagonal. În figura 13.1 este reprezentată proiecția unei

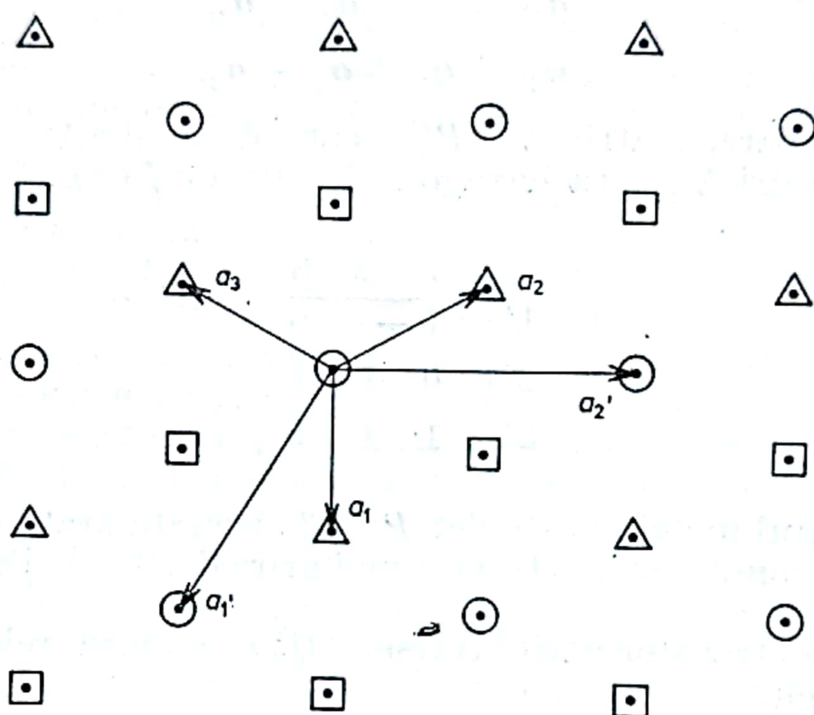


Fig. 13.1. Vectorii bazei sistemelor de coordonare romboedric și hexagonal dintr-o rețea romboedrică. Nodurile notate cu cerculețe se află în planul desenului, cele însemnate cu triunghiuri — deasupra desenului, iar cele cu pătrate — sub planul desenului.

rețele romboedrice în planul fundamental. Vom considera că nodurile reprezentate prin cerculețe se află în planul desenului. Imediat deasupra acestui plan sînt dispuse nodurile reprezentate prin triunghiuri, iar imediat sub același plan, nodurile reprezentate prin pătrate. Întregul tablou se repetă periodic : astfel, imediat deasupra planului nodurilor notate cu triunghiuri se află planul nodurilor marcate cu pătrate, iar următorul deasupra acestui plan va fi planul nodurilor notate cu cerculețe.

Vectorii bazei sistemului de coordonate romboedric, $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$, pleacă dintr-un nod, care se află în planul desenului, spre nodurile cele mai apropiate din planul care se află imediat deasupra planului desenului.

Vectorii bazei sistemului de coordonate hexagonal, $\boldsymbol{a}_{1'}$ şi $\boldsymbol{a}_{2'}$, se află în planul desenului. Cel de al treilea dintre ei, $\boldsymbol{a}_{3'}$, nu este reprezentat în desen, deoarece el este perpendicular pe planul desenului; acest vector este orientat dinspre nodul origine spre nodul cel mai apropiat, ce se află imediat deasupra planului desenului.

Din figura 13.1 rezultă clar relaţiile care leagă vectorii bazei ambelor sisteme. Anume

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a}_{1'} &= \boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2, \\ \boldsymbol{a}_{2'} &= \qquad\ \boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{a}_3, \\ \boldsymbol{a}_{3'} &= \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{a}_3. \end{aligned} \tag{13.28}$$

Prin urmare, matricea $\| P^{\alpha}_{\beta'} \|$, care defineşte trecerea de la baza romboedrică la cea hexagonală, este de forma

$$\begin{array}{c|ccc} & 1 & 2 & 3 \\ \hline 1' & 1 & -1 & 0 \\ 2' & 0 & 1 & -1 \\ 3' & 1 & 1 & 1 \end{array} \tag{13.29}$$

Determinantul matricei este $\det P = 3$; aceasta arată că volumul celulei hexagonale este de trei ori mai mare decît cel al celulei romboedrice.

Matricea transformării inverse, $\| Q^{\beta'}_{\gamma} \|$, conform relaţiei (13.7), este egală cu

$$\begin{array}{c|ccc} & 1' & 2' & 3' \\ \hline 1 & 2/3 & 1/3 & 1/3 \\ 2 & -1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 3 & -1/3 & -2/3 & 1/3 \end{array} \tag{13.30}$$

Rezultă că vectorii bazei romboedrice se descompun după vectorii bazei hexagonale astfel

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a}_1 &= \frac{1}{3}(2\boldsymbol{a}_{1'} + \boldsymbol{a}_{2'} + \boldsymbol{a}_{3'}), \\ \boldsymbol{a}_2 &= \frac{1}{3}(-\boldsymbol{a}_{1'} + \boldsymbol{a}_{2'} + \boldsymbol{a}_{3'}), \\ \boldsymbol{a}_3 &= \frac{1}{3}(-\boldsymbol{a}_{1'} - 2\boldsymbol{a}_{2'} + \boldsymbol{a}_{3'}). \end{aligned} \tag{13.31}$$

Aşa cum s-a remarcat deja, cristalele sistemelor trigonal şi hexagonal sînt desemnate acum cu ajutorul indicilor Bravais; însă aceştia din urmă sînt legaţi de sistemul de coordonate hexagonal. Dar, demult, pentru reprezentarea cristalelor sistemului trigonal erau preferaţi indicii Miller, legaţi de sistemul de coordonate romboedric — un astfel de procedeu a şi fost utilizat de cunoscutul cristalograf P. Groth în clasicul său îndrumar (Groth, 1897); de altfel, unii îi mai utilizează cîteodată chiar şi în zilele noastre. Subliniem faptul că Groth a folosit indicii Miller nu numai pentru desemnarea cristalelor care au reţeaua Bravais romboedrică, ci şi pentru cristalele sistemului trigonal, a căror reţea Bravais este hexagonală. În acest ultim caz, celula romboedrică trebuie considerată drept celulă elementară, însă nu primitivă, celulă primitivă fiind celula hexagonală.

Pentru a elucida şi în acest caz legătura dintre baza romboedrică şi cea haxagonală, ne vom referi din nou la figura 13.1. Să ne imaginăm că nodurile însemnate cu triunghiuri şi cele cu pătrate lipsesc. Nodurile rămase, cele notate cu cerculeţe, vor forma reţeaua Bravais hexagonală; celula sa elementară este definită de vectorii $\boldsymbol{a}_{1'}$, $\boldsymbol{a}_{2'}$, $\boldsymbol{a}_{3'}$. Să remarcăm acum că vectorii $3\boldsymbol{a}_1$, $3\boldsymbol{a}_2$ şi $3\boldsymbol{a}_3$ sînt vectorii reţelei Bravais hexagonale, astfel obţinute. Ei sînt, evident, tocmai cei care definesc celula elementară romboedrică; după cum se poate vedea uşor, volumul acesteia este de trei ori mai mare decît volumul celulei primitive hexagonale.

Să stabilim relaţiile dintre indicii Bravais, legaţi de sistemul de coordonate hexagonal, şi indicii Miller, legaţi de sistemul de coordonate romboedric. Să începem cu simbolurile direcţiilor (muchiilor). Fie direcţia cristalografică definită de indicii Bravais $[r^1r^2r^3r^4]$. Conform formulei (12.19), vectorul corespunzător este

$$\boldsymbol{l} = (r^1 - r^3)\,\boldsymbol{a}_{1'} + (r^2 - r^3)\,\boldsymbol{a}_{2'} + r^4\boldsymbol{a}_{3'}.$$

Folosind relaţia (13.23), vom descompune vectorii bazei sistemului de coordonate hexagonal, $\boldsymbol{a}_{1'}$, $\boldsymbol{a}_{2'}$, $\boldsymbol{a}_{3'}$, după baza sistemului de coordonate romboedric

$$\boldsymbol{l} = (r^1 - r^3)\,(\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2) + (r^2 - r^3)\,(\boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{a}_3) + r^4(\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{a}_3).$$

După reducerea termenilor asemenea, obţinem

$$\boldsymbol{l} = (r^1 - r^3 + r^4)\boldsymbol{a}_1 + (r^2 - r^1 + r^4)\,\boldsymbol{a}_2 + (r^3 - r^2 + r^4)\boldsymbol{a}_3.$$

Prin urmare, indicii Miller ai direcţiei $[r^1r^2r^3r^4]$ sînt

$$[r^1 - r^3 + r^4. \quad r^2 - r^1 + r^4. \quad r^3 - r^2 + r^4]. \qquad (13.32)$$

Desigur, dacă aceasta este posibil, ei trebuie simplificaţi.

Fie acum, dimpotrivă, ca o direcție oarecare să se definească în sistemul de coordonate romboedric, cu ajutorul indicilor Miller, $[l^1l^2l^3]$, adică vectorul ce îi corespunde este

$$\boldsymbol{l} = l^1\boldsymbol{a}_1 + l^2\boldsymbol{a}_2 + l^3\boldsymbol{a}_3.$$

Utilizînd relațiile (13.4), vom descompune vectorii $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ după baza sistemului hexagonal, $\boldsymbol{a}_{1'}$, $\boldsymbol{a}_{2'}$, $\boldsymbol{a}_{3'}$. După reducerea termenilor asemenea ai sistemului, obținem

$$\boldsymbol{l} = \frac{2l^1 - l^2 - l^3}{3}\boldsymbol{a}_{1'} + \frac{l^1 + l^2 - 2l^3}{3}\boldsymbol{a}_{2'} + \frac{l^1 + l^2 + l^3}{3}\boldsymbol{a}_{3'}.$$

Iar acum, cu ajutorul relației (12.18) aflăm indicii Bravais

$$[l^1 - l^2.\quad l^2 - l^3.\ l^3 - l^1.\ l^1 + l^2 + l^3]. \qquad (13.33)$$

Să trecem la simbolurile planurilor cristalografice (ale fețelor). Fie indicii Bravais ai unui plan cristalografic dat $(p_1p_2p_3p_4)$. Conform relațiilor (12.22), aceasta înseamnă că vectorul normalei sale este

$$\boldsymbol{n} = p_1\,\boldsymbol{a}^{1'} + p_2\boldsymbol{a}^{2'} + p_4\boldsymbol{a}^{3'}.$$

Componentele covariante ale acestui vector în sistemul de coordonate hexagonal vor fi

$$n_{1'} = p_1, \qquad n_{2'} = p_2, \qquad n_{3'} = p_4.$$

Componentele covariante ale aceluiași vector, n_1, n_2, n_3, în sistemul de coordonate romboedric le vom găsi aplicînd formula (13.22), elementele matricei Q fiind transcrise în (13.30). Obținem

$$n_1 = \frac{1}{3}(2n_{1'} + n_{2'} + n_{3'}) = \frac{1}{3}(p_1 - p_3 + p_4),$$

$$n_2 = \frac{1}{3}(-n_{1'} + n_{2'} + n_{3'}) = \frac{1}{3}(p_2 - p_1 + p_4),$$

$$n_3 = \frac{1}{3}(-n_{1'} - 2n_{2'} + n_{3'}) = \frac{1}{3}(p_3 - p_2 + p_4).$$

Prin urmare, indicii Miller ai planului, $(p_1p_2p_3p_4)$, sînt

$$(p_1 - p_3 + p_4. \quad p_2 - p_1 + p_4. \quad p_3 - p_2 + p_4). \qquad (13.34)$$

Viceversa, dacă planul cristalografic este definit prin indicii Miller $(n_1n_2n_3)$, în raport cu un sistem de coordonate romboedric, atunci vectorul normalei sale este

$$\boldsymbol{n} = n_1\boldsymbol{a}^1 + n_2\boldsymbol{a}^2 + n_3\boldsymbol{a}^3.$$

Componentele covariante ale vectorului $\boldsymbol{n}$, în sistemul de coordonate hexagonal, vor fi calculate cu relaţia (13.21); elementele matricei P sînt transcrise în (13.29). Componentele $n_{\beta'}$ sînt egale cu

$$n_{1'} = n_1 - n_2,$$

$$n_{2'} = n_2 - n_3,$$

$$n_{3'} = n_1 + n_2 + n_3.$$

Acum, folosind formula (12.22), aflăm indicii Bravais ai acestui plan

$$(n_1 - n_2. \quad n_2 - n_3. \quad n_3 - n_1. \quad n_1 + n_2 + n_3). \qquad (13.35)$$

Relaţiile (12.32) şi (13.33), care leagă indicii Bravais ai direcţiilor cristalografice cu indicii Miller ai lor din sistemul de coordonate romboedric, coincid cu formulele (13.34) şi (13.35), care leagă indicii Bravais de indicii Miller ai planurilor cristalografice. Acest fapt este folosit în tabelul 13.1; indicii Bravais din sistemul de coordonate hexagonal (BH) şi indicii Miller din sistemul de coordonate romboedric (MR), cuprinşi în el, se referă în egală măsură atît la planuri (feţe) cît şi la direcţii (muchii). În tabel sînt cuprinşi, de asemenea, şi indicii Miller pentru planurile şi direcţiile raportate la sistemul de coordonate hexagonal. Primii dintre (MHP) sînt coeficienţii n_α ai descompunerii vectorului normalei planului cristalografic,

$$\boldsymbol{n} = n_\alpha\boldsymbol{a}^\alpha$$

după vectorii fundamentali ai reţelei reciproce, $\boldsymbol{a}^\alpha$; ceilalţi (MHD) sînt coeficienţii l^α ai descompunerii vectorului unei direcţii cristalografice,

$$\boldsymbol{l} = l^\alpha\boldsymbol{a}_\alpha$$

după vectorii fundamentali ai reţelei cristaline, $\boldsymbol{a}_\alpha$. Cu alte cuvinte, MHP sînt componentele covariante ale vectorului $\boldsymbol{n}$, iar MHD sînt componentele contravariante ale vectorului $\boldsymbol{l}$.

Tabelul 13.1

Indicii Bravais într-o structură hexagonală (BH), indicii Miller într-o structură hexagonală pentru planuri (MHP) şi pentru direcţii (MHD) şi indicii Miller într-o structură romboedrică (MR)

BH	MHP	MHD	MR	BH	MHP	MHD	MR	BH	MHP	MHD	MR
0001	001	001	111	$2\bar{1}\bar{1}2$	$2\bar{1}2$	302	$5\bar{1}2$	$\bar{3}301$	$\bar{3}31$	$\bar{3}31$	$\bar{2}7\bar{2}$
$2\bar{1}\bar{1}0$	$2\bar{1}0$	100	$1\bar{1}0$	$\bar{1}2\bar{1}2$	$\bar{1}22$	032	$25\bar{1}$	$0\bar{3}31$	$0\bar{3}1$	$\bar{3}\bar{6}1$	$\bar{2}\bar{2}7$
$\bar{1}2\bar{1}0$	$\bar{1}20$	010	$01\bar{1}$	$\bar{1}\bar{1}22$	$\bar{1}\bar{1}2$	$\bar{3}\bar{3}2$	$\bar{1}25$	$\bar{3}031$	$\bar{3}01$	$\bar{6}\bar{3}1$	$\bar{5}44$
$\bar{1}\bar{1}20$	$\bar{1}\bar{1}0$	$\bar{1}\bar{1}0$	$\bar{1}01$	$\bar{2}112$	$\bar{2}12$	$\bar{3}02$	$\bar{1}52$	$3\bar{3}01$	$3\bar{3}1$	$3\bar{3}1$	$4\bar{5}4$
$\bar{2}110$	$\bar{2}10$	$\bar{1}00$	$\bar{1}10$	$1\bar{2}12$	$1\bar{2}2$	$0\bar{3}2$	$2\bar{1}5$	$03\bar{3}1$	031	361	$44\bar{5}$
$1\bar{2}10$	$1\bar{2}0$	$0\bar{1}0$	$0\bar{1}1$	$11\bar{2}2$	112	332	$52\bar{1}$	$30\bar{3}2$	302	632	$8\bar{1}\bar{1}$
$11\bar{2}0$	110	110	$10\bar{1}$	$3\bar{1}\bar{2}0$	$3\bar{1}0$	510	$5\bar{4}\bar{1}$	$\bar{3}302$	$\bar{3}32$	$\bar{3}32$	$\bar{1}8\bar{1}$
$10\bar{1}0$	100	210	$2\bar{1}\bar{1}$	$\bar{2}3\bar{1}0$	$\bar{2}30$	$\bar{1}40$	$\bar{1}5\bar{4}$	$0\bar{3}32$	$0\bar{3}2$	$\bar{3}\bar{6}2$	$\bar{1}\bar{1}8$
$\bar{1}100$	$\bar{1}10$	$\bar{1}10$	$\bar{1}2\bar{1}$	$\bar{1}\bar{2}30$	$\bar{1}\bar{2}0$	$\bar{4}\bar{5}0$	$\bar{4}\bar{1}5$	$\bar{3}032$	$\bar{3}02$	$\bar{6}\bar{3}2$	$\bar{4}55$
$0\bar{1}10$	$0\bar{1}0$	$\bar{1}\bar{2}0$	$\bar{1}\bar{1}2$	$\bar{3}120$	$\bar{3}10$	$\bar{5}\bar{1}0$	$\bar{5}41$	$3\bar{3}02$	$3\bar{3}2$	$3\bar{3}2$	$5\bar{4}5$
$\bar{1}010$	$\bar{1}00$	$\bar{2}\bar{1}0$	$\bar{2}11$	$2\bar{3}10$	$2\bar{3}0$	$1\bar{4}0$	$1\bar{5}4$	$03\bar{3}2$	032	362	$55\bar{4}$
$1\bar{1}00$	$1\bar{1}0$	$1\bar{1}0$	$1\bar{2}1$	$12\bar{3}0$	120	450	$41\bar{5}$	$20\bar{2}3$	203	423	711
$01\bar{1}0$	010	120	$11\bar{2}$	$3\bar{2}\bar{1}0$	$3\bar{2}0$	$4\bar{1}0$	$4\bar{5}1$	$\bar{2}203$	$\bar{2}23$	$\bar{2}23$	171
$10\bar{1}1$	101	211	100	$\bar{1}3\bar{2}0$	$\bar{1}30$	150	$14\bar{5}$	$0\bar{2}23$	$0\bar{2}3$	$\bar{2}\bar{4}3$	117
$\bar{1}101$	$\bar{1}11$	$\bar{1}11$	010	$\bar{2}\bar{1}30$	$\bar{2}\bar{1}0$	$\bar{5}\bar{4}0$	$\bar{5}14$	$\bar{2}023$	$\bar{2}03$	$\bar{4}\bar{2}3$	$\bar{1}55$
$0\bar{1}11$	$0\bar{1}1$	$\bar{1}\bar{2}1$	001	$\bar{3}210$	$\bar{3}20$	$\bar{4}10$	$\bar{4}5\bar{1}$	$2\bar{2}03$	$2\bar{2}3$	$2\bar{2}3$	$5\bar{1}5$
$\bar{1}011$	$\bar{1}01$	$\bar{2}\bar{1}1$	$\bar{1}22$	$1\bar{3}20$	$1\bar{3}0$	$\bar{1}\bar{5}0$	$\bar{1}\bar{4}5$	$02\bar{2}3$	023	243	$55\bar{1}$
$1\bar{1}01$	$1\bar{1}1$	$1\bar{1}1$	$2\bar{1}2$	$21\bar{3}0$	210	540	$5\bar{1}\bar{4}$	$40\bar{4}1$	401	841	$3\bar{1}\bar{1}$
$01\bar{1}1$	011	121	$22\bar{1}$	$3\bar{1}\bar{2}1$	$3\bar{1}1$	511	$2\bar{1}0$	$\bar{4}401$	$\bar{4}41$	$\bar{4}41$	$\bar{1}3\bar{1}$
$\bar{2}021$	$\bar{2}01$	$\bar{4}\bar{2}1$	$\bar{1}11$	$\bar{2}3\bar{1}1$	$\bar{2}31$	$\bar{1}41$	$02\bar{1}$	$0\bar{4}41$	$0\bar{4}1$	$\bar{4}\bar{8}1$	$\bar{1}\bar{1}3$
$2\bar{2}01$	$2\bar{2}1$	$2\bar{2}1$	$1\bar{1}1$	$\bar{1}\bar{2}31$	$\bar{1}\bar{2}1$	$\bar{4}\bar{5}1$	$\bar{1}02$	$\bar{4}041$	$\bar{4}01$	$\bar{8}\bar{4}1$	$\bar{7}55$
$02\bar{2}1$	021	241	$11\bar{1}$	$\bar{3}121$	$\bar{3}11$	$\bar{5}\bar{1}1$	$\bar{4}52$	$4\bar{4}01$	$4\bar{4}1$	$4\bar{4}1$	$5\bar{7}5$
$20\bar{2}1$	201	421	$5\bar{1}\bar{1}$	$2\bar{3}11$	$2\bar{3}1$	$1\bar{4}1$	$2\bar{4}5$	$04\bar{4}1$	041	481	$55\bar{7}$
$\bar{2}201$	$\bar{2}21$	$\bar{2}21$	$\bar{1}5\bar{1}$	$12\bar{3}1$	121	451	$52\bar{4}$	$2\bar{1}\bar{1}4$	$2\bar{1}4$	304	714
$0\bar{2}21$	$0\bar{2}1$	$\bar{2}\bar{4}1$	$\bar{1}\bar{1}5$	$3\bar{2}\bar{1}1$	$3\bar{2}1$	$4\bar{1}1$	$5\bar{4}2$	$\bar{1}2\bar{1}4$	$\bar{1}24$	034	471
$2\bar{1}\bar{1}1$	$2\bar{1}1$	301	$4\bar{2}1$	$\bar{1}3\bar{2}1$	$\bar{1}31$	151	$25\bar{4}$	$\bar{1}\bar{1}24$	$\bar{1}\bar{1}4$	$\bar{3}\bar{3}4$	147
$\bar{1}2\bar{1}1$	$\bar{1}21$	031	$14\bar{2}$	$\bar{2}\bar{1}31$	$\bar{2}\bar{1}1$	$\bar{5}\bar{4}1$	$\bar{4}25$	$\bar{2}114$	$\bar{2}14$	$\bar{3}04$	174
$\bar{1}\bar{1}21$	$\bar{1}\bar{1}1$	$\bar{3}\bar{3}1$	$\bar{2}14$	$\bar{3}211$	$\bar{3}21$	$\bar{4}11$	$\bar{1}20$	$1\bar{2}14$	$1\bar{2}4$	$0\bar{3}4$	417
$\bar{2}111$	$\bar{2}11$	$\bar{3}01$	$\bar{2}41$	$1\bar{3}21$	$1\bar{3}1$	$\bar{1}\bar{5}1$	$0\bar{1}2$	$11\bar{2}4$	114	334	741
$1\bar{2}11$	$1\bar{2}1$	$0\bar{3}1$	$1\bar{2}4$	$21\bar{3}1$	211	541	$20\bar{1}$	$4\bar{2}\bar{2}1$	$4\bar{2}1$	601	$7\bar{5}1$
$11\bar{2}1$	111	331	$41\bar{2}$	$2\bar{1}\bar{1}3$	$2\bar{1}3$	101	201	$\bar{2}4\bar{2}1$	$\bar{2}41$	061	$17\bar{5}$
$\bar{1}012$	$\bar{1}02$	$\bar{2}\bar{1}2$	011	$\bar{1}2\bar{1}3$	$\bar{1}23$	011	120	$\bar{2}\bar{2}41$	$\bar{2}\bar{2}1$	$\bar{6}\bar{6}1$	$\bar{5}17$
$1\bar{1}02$	$1\bar{1}2$	$1\bar{1}2$	101	$\bar{1}\bar{1}23$	$\bar{1}\bar{1}3$	$\bar{1}\bar{1}1$	012	$\bar{4}221$	$\bar{4}21$	$\bar{6}01$	$\bar{5}71$
$01\bar{1}2$	012	122	110	$\bar{2}113$	$\bar{2}13$	$\bar{1}01$	021	$2\bar{4}21$	$2\bar{4}1$	$0\bar{6}1$	$1\bar{5}7$
$10\bar{1}2$	102	212	411	$1\bar{2}13$	$1\bar{2}3$	$0\bar{1}1$	102	$22\bar{4}1$	221	661	$71\bar{5}$
$\bar{1}102$	$\bar{1}12$	$\bar{1}12$	141	$11\bar{2}3$	113	111	210	$4\bar{2}\bar{2}3$	$4\bar{2}3$	201	$3\bar{1}1$
$0\bar{1}12$	$0\bar{1}2$	$\bar{1}\bar{2}2$	114	$30\bar{3}1$	301	631	$7\bar{2}\bar{2}$	$\bar{2}4\bar{2}3$	$\bar{2}43$	021	$13\bar{1}$

Tabelul 13.1 (continuare)

BH	MHP	MHD	MR	BH	MHP	MHD	MR	BH	MHP	MHD	MR
$\bar{2}\bar{2}43$	$\bar{2}\bar{2}3$	$\bar{2}\bar{2}1$	$\bar{1}13$	$13\bar{4}0$	130	570	$52\bar{7}$	$\bar{3}\bar{1}42$	$\bar{3}\bar{1}2$	$\bar{7}52$	$\bar{5}47$
$\bar{4}223$	$\bar{4}23$	$\bar{2}01$	$\bar{1}31$	$4\bar{3}\bar{1}0$	$4\bar{3}0$	$5\bar{2}0$	$5\bar{7}\bar{2}$	$\bar{4}312$	$\bar{4}32$	$\bar{5}22$	$\bar{1}30$
$2\bar{4}23$	$2\bar{4}3$	$0\bar{2}1$	$1\bar{1}3$	$\bar{1}4\bar{3}0$	$\bar{1}40$	270	$25\bar{7}$	$1\bar{4}32$	$1\bar{4}2$	$\bar{2}\bar{7}2$	$0\bar{1}3$
$22\bar{4}3$	223	221	$31\bar{1}$	$\bar{3}\bar{1}40$	$\bar{3}\bar{1}0$	$\bar{7}\bar{5}0$	$\bar{7}25$	$31\bar{4}2$	312	752	$30\bar{1}$
$10\bar{1}3$	103	213	522	$\bar{4}310$	$\bar{4}30$	$\bar{5}20$	$\bar{5}7\bar{2}$	$20\bar{2}5$	205	425	311
$\bar{1}103$	$\bar{1}13$	$\bar{1}13$	252	$1\bar{4}30$	$1\bar{4}0$	$\bar{2}\bar{7}0$	$\bar{2}\bar{5}7$	$\bar{2}205$	$\bar{2}25$	$\bar{2}25$	131
$0\bar{1}13$	$0\bar{1}3$	$\bar{1}\bar{2}3$	225	$31\bar{4}0$	310	750	$7\bar{2}\bar{5}$	$0\bar{2}25$	$0\bar{2}5$	$\bar{2}\bar{4}5$	113
$\bar{1}013$	$\bar{1}03$	$\bar{2}\bar{1}3$	144	$5\bar{2}\bar{3}0$	$5\bar{2}0$	810	$8\bar{7}\bar{1}$	$\bar{2}025$	$\bar{2}05$	$\bar{4}\bar{2}5$	177
$1\bar{1}03$	$1\bar{1}3$	$1\bar{1}3$	414	$\bar{3}5\bar{2}0$	$\bar{3}50$	$\bar{1}70$	$\bar{1}8\bar{7}$	$2\bar{2}05$	$2\bar{2}5$	$2\bar{2}5$	717
$01\bar{1}3$	013	123	441	$\bar{2}\bar{3}50$	$\bar{2}\bar{3}0$	$\bar{7}\bar{8}0$	$\bar{7}18$	$02\bar{2}5$	025	245	771
$10\bar{1}4$	104	214	211	$\bar{5}230$	$\bar{5}20$	$\bar{8}\bar{1}0$	$\bar{8}71$	$30\bar{3}4$	304	634	$10.1.1$
$\bar{1}104$	$\bar{1}14$	$\bar{1}14$	121	$3\bar{5}20$	$3\bar{5}0$	$1\bar{7}0$	$1\bar{8}7$	$\bar{3}304$	$\bar{3}34$	$\bar{3}34$	$1.10.1$
$0\bar{1}14$	$0\bar{1}4$	$\bar{1}\bar{2}4$	112	$23\bar{5}0$	230	780	$71\bar{8}$	$0\bar{3}34$	$0\bar{3}4$	$\bar{3}\bar{6}4$	$1.1.10$
$\bar{1}014$	$\bar{1}04$	$\bar{2}\bar{1}4$	255	$5\bar{3}\bar{2}0$	$5\bar{3}0$	$7\bar{1}0$	$7\bar{8}1$	$\bar{3}031$	$\bar{3}04$	$\bar{6}\bar{3}4$	$\bar{2}77$
$1\bar{1}04$	$1\bar{1}4$	$1\bar{1}4$	525	$\bar{2}5\bar{3}0$	$\bar{2}50$	180	$17\bar{8}$	$3\bar{3}04$	$3\bar{3}4$	$3\bar{3}4$	$7\bar{2}7$
$01\bar{1}4$	014	124	552	$\bar{3}\bar{2}50$	$\bar{3}\bar{2}0$	$\bar{8}\bar{7}0$	$\bar{8}17$	$03\bar{3}4$	034	364	$77\bar{2}$
$10\bar{1}5$	105	215	744	$\bar{5}320$	$\bar{5}30$	$\bar{7}10$	$\bar{7}8\bar{1}$	$40\bar{4}3$	403	843	$11.\bar{1}.\bar{1}$
$\bar{1}105$	$\bar{1}15$	$\bar{1}15$	474	$2\bar{5}30$	$2\bar{5}0$	$\bar{1}\bar{8}0$	$\bar{1}\bar{7}8$	$\bar{4}403$	$\bar{4}43$	$\bar{4}43$	$\bar{1}.11.\bar{1}$
$0\bar{1}15$	$0\bar{1}5$	$\bar{1}\bar{2}5$	447	$32\bar{5}0$	320	870	$8\bar{1}\bar{7}$	$0\bar{4}43$	$0\bar{4}3$	$\bar{4}\bar{8}3$	$\bar{1}.\bar{1}.11$
$\bar{1}015$	$\bar{1}05$	$\bar{2}\bar{1}5$	122	$4\bar{1}\bar{3}1$	$4\bar{1}1$	721	$8\bar{4}\bar{1}$	$\bar{4}043$	$\bar{4}03$	$\bar{8}\bar{4}3$	$\bar{5}77$
$1\bar{1}05$	$1\bar{1}5$	$1\bar{1}5$	212	$\bar{3}4\bar{1}1$	$\bar{3}41$	$\bar{2}51$	$\bar{1}8\bar{4}$	$4\bar{4}03$	$4\bar{4}3$	$4\bar{4}3$	$7\bar{5}7$
$01\bar{1}5$	015	125	221	$\bar{1}\bar{3}41$	$\bar{1}\bar{3}1$	$\bar{5}\bar{7}1$	$4\bar{1}8$	$04\bar{4}3$	043	483	$77\bar{5}$
$3\bar{1}\bar{2}2$	$3\bar{1}2$	512	$7\bar{2}1$	$\bar{4}131$	$\bar{4}11$	$\bar{7}\bar{2}1$	$\bar{2}21$	$4\bar{2}\bar{2}5$	$4\bar{2}5$	605	$11.\bar{1}.5$
$\bar{2}3\bar{1}2$	$\bar{2}32$	$\bar{1}42$	$17\bar{2}$	$3\bar{4}11$	$3\bar{4}1$	$2\bar{5}1$	$1\bar{2}2$	$\bar{2}4\bar{2}5$	$\bar{2}45$	065	$5.11.\bar{1}$
$\bar{1}\bar{2}32$	$\bar{1}\bar{2}2$	$\bar{4}\bar{5}2$	$\bar{2}17$	$13\bar{4}1$	131	571	$21\bar{2}$	$\bar{2}\bar{2}45$	$\bar{2}\bar{2}5$	$\bar{6}\bar{6}5$	$\bar{1}.5.11$
$\bar{3}122$	$\bar{3}12$	$\bar{5}\bar{1}2$	$\bar{1}21$	$4\bar{3}\bar{1}1$	$4\bar{3}1$	$5\bar{2}1$	$2\bar{2}1$	$\bar{4}225$	$\bar{4}25$	$\bar{6}05$	$\bar{1}.11.5$
$2\bar{3}12$	$2\bar{3}2$	$1\bar{4}2$	$1\bar{1}2$	$\bar{1}4\bar{3}1$	$\bar{1}41$	271	$12\bar{2}$	$2\bar{4}25$	$2\bar{4}5$	$0\bar{6}5$	$5.\bar{1}.11$
$12\bar{3}2$	122	$45\bar{2}$	$21\bar{1}$	$\bar{3}\bar{1}41$	$\bar{3}\bar{1}1$	$\bar{7}\bar{5}1$	$\bar{2}12$	$22\bar{4}5$	225	665	$11.5.\bar{1}$
$3\bar{2}\bar{1}2$	$3\bar{2}2$	$4\bar{1}2$	$2\bar{1}1$	$\bar{4}311$	$\bar{4}31$	$\bar{5}21$	$\bar{4}8\bar{1}$	$50\bar{5}2$	502	$10.5.2$	$4\bar{1}\bar{1}$
$\bar{1}3\bar{2}2$	$\bar{1}32$	152	$12\bar{1}$	$1\bar{4}31$	$1\bar{4}1$	$\bar{2}\bar{7}1$	$\bar{1}\bar{4}8$	$\bar{5}502$	$\bar{5}52$	$\bar{5}52$	$\bar{1}4\bar{1}$
$\bar{2}\bar{1}32$	$\bar{2}\bar{1}2$	$\bar{5}\bar{4}2$	$\bar{1}12$	$31\bar{4}1$	311	751	$8\bar{1}\bar{4}$	$0\bar{5}52$	$0\bar{5}2$	$\bar{5}.\overline{10}.2$	$\bar{1}\bar{1}4$
$\bar{3}212$	$\bar{3}22$	$\bar{4}12$	$\bar{2}71$	$4\bar{1}\bar{3}2$	$4\bar{1}2$	722	$3\bar{1}0$	$\bar{5}052$	$\bar{5}02$	$\overline{10}.\bar{5}.2$	$\bar{8}77$
$1\bar{3}22$	$1\bar{3}2$	$\bar{1}\bar{5}2$	$1\bar{2}7$	$\bar{3}4\bar{1}2$	$\bar{3}42$	$\bar{2}52$	$03\bar{1}$	$5\bar{5}02$	$5\bar{5}2$	$5\bar{5}2$	$7\bar{8}7$
$21\bar{3}2$	212	542	$71\bar{2}$	$\bar{1}\bar{3}42$	$\bar{1}\bar{3}2$	$\bar{5}\bar{7}2$	$\bar{1}03$	0552	052	$5.10.2$	$77\bar{8}$
$4\bar{1}\bar{3}0$	$4\bar{1}0$	720	$7\bar{5}\bar{2}$	$\bar{4}132$	$\bar{4}12$	$\bar{7}\bar{2}2$	$\bar{5}74$	$6\bar{1}\bar{5}1$	$6\bar{1}1$	$11.4.1$	$4\bar{2}\bar{1}$
$\bar{3}4\bar{1}0$	$\bar{3}40$	$\bar{2}50$	$\bar{2}7\bar{5}$	$3\bar{4}12$	$3\bar{4}2$	$2\bar{5}2$	$4\bar{5}7$	$\bar{5}6\bar{1}1$	$\bar{5}61$	$\bar{4}71$	$\bar{1}4\bar{2}$
$\bar{1}\bar{3}40$	$\bar{1}\bar{3}0$	$\bar{5}\bar{7}0$	$\bar{5}\bar{2}7$	$13\bar{4}2$	132	572	$74\bar{5}$	$\bar{1}\bar{5}61$	$\bar{1}\bar{5}1$	$\bar{7}.\overline{11}.1$	214
$\bar{4}130$	$\bar{4}10$	$\bar{7}\bar{2}0$	$\bar{7}52$	$4\bar{3}\bar{1}2$	$4\bar{3}2$	$5\bar{2}2$	$7\bar{5}4$	$\bar{6}151$	$\bar{6}11$	$\overline{11}.\bar{4}.1$	$10.8.5$
$3\bar{4}10$	$3\bar{4}0$	$2\bar{5}0$	$2\bar{7}5$	$\bar{1}4\bar{3}2$	$\bar{1}42$	272	$47\bar{5}$	$5\bar{6}11$	$5\bar{6}1$	$4\bar{7}1$	$5.10.8$
$15\bar{6}1$	151	$7.11.1$	$\bar{8}.5.\overline{10}$	$4\bar{5}10$	$4\bar{5}0$	$1\bar{2}0$	$1\bar{3}2$	$\bar{3}\bar{2}52$	$\bar{3}\bar{2}2$	$\bar{8}\bar{7}2$	$\bar{2}13$

Tabelul 13.1 (continuare)

BH	MHP	MHD	MR	BH	MHP	MHD	MR	BH	MHP	MHD	MR
$6\bar{5}\bar{1}1$	$6\bar{5}1$	$7\bar{4}1$	$8.\overline{10}.5$	$14\bar{5}0$	140	230	$21\bar{3}$	$\bar{5}322$	$\bar{5}32$	$\bar{7}12$	$\bar{5}.10.1$
$\bar{1}6\bar{5}1$	$\bar{1}61$	4.11.1	$5.8.\overline{10}$	$5\bar{4}\bar{1}0$	$5\bar{4}0$	$2\bar{1}0$	$2\bar{3}1$	$2\bar{5}32$	$2\bar{5}2$	$\overline{18}2$	$1.\bar{5}.10$
$\bar{5}\bar{1}61$	$\bar{5}\bar{1}1$	$\overline{11}.\bar{7}.1$	$\overline{10}.5.8$	$\bar{1}5\bar{4}0$	$\bar{1}50$	130	$12\bar{3}$	$32\bar{5}2$	322	872	$10.1.\bar{5}$
$\bar{6}511$	$\bar{6}51$	$\bar{7}41$	$\bar{2}4\bar{1}$	$\bar{4}\bar{1}50$	$\bar{4}\bar{1}0$	$\overline{32}0$	$\bar{3}12$	$4\bar{1}\bar{3}4$	$4\bar{1}4$	724	$11.\bar{1}.2$
$1\bar{6}51$	$1\bar{6}1$	$\bar{4}.\overline{11}.1$	$\overline{12}4$	$\bar{5}410$	$\bar{5}10$	$\bar{2}10$	$\bar{2}3\bar{1}$	$\bar{3}4\bar{1}4$	$\bar{3}44$	$\bar{2}54$	$2.11.\bar{1}$
$51\bar{6}1$	511	11.7.1	$4\bar{1}\bar{2}$	$1\bar{5}40$	$1\bar{5}0$	$\overline{13}0$	$\overline{12}3$	$\overline{13}44$	$\overline{13}4$	$\bar{5}\bar{7}4$	$\bar{1}.2.11$
$2\bar{1}\bar{1}6$	$2\bar{1}6$	306	312	$41\bar{5}0$	410	320	$3\bar{1}\bar{2}$	$\bar{4}134$	$\bar{4}14$	$\bar{7}\bar{2}4$	$\bar{1}32$
$\bar{1}2\bar{1}6$	$\bar{1}26$	036	231	$5\bar{2}\bar{3}2$	$5\bar{2}2$	812	$10.\bar{5}.1$	$3\bar{4}14$	$3\bar{4}4$	$2\bar{5}4$	$2\bar{1}3$
$\bar{1}\bar{1}26$	$\bar{1}\bar{1}6$	$\overline{33}6$	123	$\bar{3}5\bar{2}2$	$\bar{3}52$	$\bar{1}72$	$1.10.\bar{5}$	$13\bar{4}4$	134	574	$32\bar{1}$
$\bar{2}116$	$\bar{2}16$	$\bar{3}06$	132	$\bar{2}\bar{3}52$	$\overline{23}5$	$\overline{78}2$	$\bar{5}.1.10$	$4\bar{3}\bar{1}4$	$4\bar{3}4$	$5\bar{2}4$	$3\bar{1}2$
$1\bar{2}16$	$1\bar{2}6$	$0\bar{3}6$	213	$\bar{5}232$	$\bar{5}22$	$\overline{81}2$	$\bar{2}31$	$\bar{1}4\bar{3}4$	$\bar{1}44$	274	$23\bar{1}$
$11\bar{2}6$	116	336	321	$3\bar{5}22$	$3\bar{5}2$	$1\bar{7}2$	$1\bar{2}3$	$\overline{31}44$	$\bar{3}\bar{1}4$	$\bar{7}\bar{5}4$	$\bar{1}23$
$5\overline{14}0$	$5\bar{1}0$	310	$3\bar{2}\bar{1}$	$23\bar{5}2$	232	782	$31\bar{2}$	$\bar{4}314$	$\bar{4}34$	$\bar{5}24$	$\bar{1}.11.2$
$\bar{4}5\bar{1}0$	$\bar{4}50$	$\bar{1}20$	$\bar{1}3\bar{2}$	$5\bar{3}\bar{2}2$	$5\bar{3}2$	$7\bar{1}2$	$3\bar{2}1$	$1\bar{4}34$	$1\bar{4}4$	$\bar{2}\bar{7}4$	$2.\bar{1}.11$
$\overline{14}50$	$\bar{1}\bar{4}0$	$\bar{2}\bar{3}0$	$\overline{21}3$	$\bar{2}5\bar{3}2$	$\bar{2}52$	182	$13\bar{2}$	$31\bar{4}4$	314	754	$11.2.\bar{1}$
$\bar{5}140$	$\bar{5}10$	$\bar{3}\bar{1}0$	$\bar{3}21$								

O b s e r v a ţ i e. În tabel sînt cuprinse simbolurile planurilor şi direcţiilor care se proiectează pe emisfera superioară a sferei proiecţiilor; de aceea, în primele trei coloane, ultimul indice este nenegativ, pe cînd în ultima coloană este nenegativă suma indicilor. Dacă planul sau direcţia sînt proiectate pe emisfera inferioară a sferei proiecţiilor, atunci trebuie examinat simbolul planului opus sau al direcţiei inverse — toţi indicii lui sînt de semn contrar. Astfel, un simbol BH $31\overline{44}$ nu există în tabel, însă găsind în tabel simbolul BH $\overline{31}44$ găsim că simbolului BH $31\overline{44}$ ii corespund simbolurile MHP $31\bar{4}$, MHD $7\bar{5}4$ şi MR $12\bar{3}$.

§ 14. COMPLECŞII SIMETRIC ECHIVALENŢI AI PLANURILOR ŞI DIRECŢIILOR. FORMELE SIMPLE ALE CRISTALELOR

Transformările simetrice, proprii grupului punctual de simetrie al cristalului, repetă simetric în spaţiu orice plan şi orice direcţie a unui cristal. Fie dat, de pildă, planul (100) al unui cristal din clasa *m3m*. Repetîndu-l prin toate transformările simetrice, obţinem planurile $(\bar{1}00)$, (010), $(0\bar{1}0)$, (001), $(00\bar{1})$. Întregul set al acestor şase planuri simetric echivalente îl vom nota cu simbolul {100} : parantezele acolade arată că indicii pot fi supuşi la toate permutările corespunzătoare transformărilor simetrice ale clasei de simetrie date. Dacă simbolul (100) desemnează reţeaua plană a structurii, atunci simbolul {100} va desemna setul celor trei planuri de coordonate din reţeaua cristalului şi totalitatea planurilor paralele cu ele. Dacă însă simbolul (100) desemnează o faţă a cristalului, atunci {100} va desemna forma simplă a cristalului,

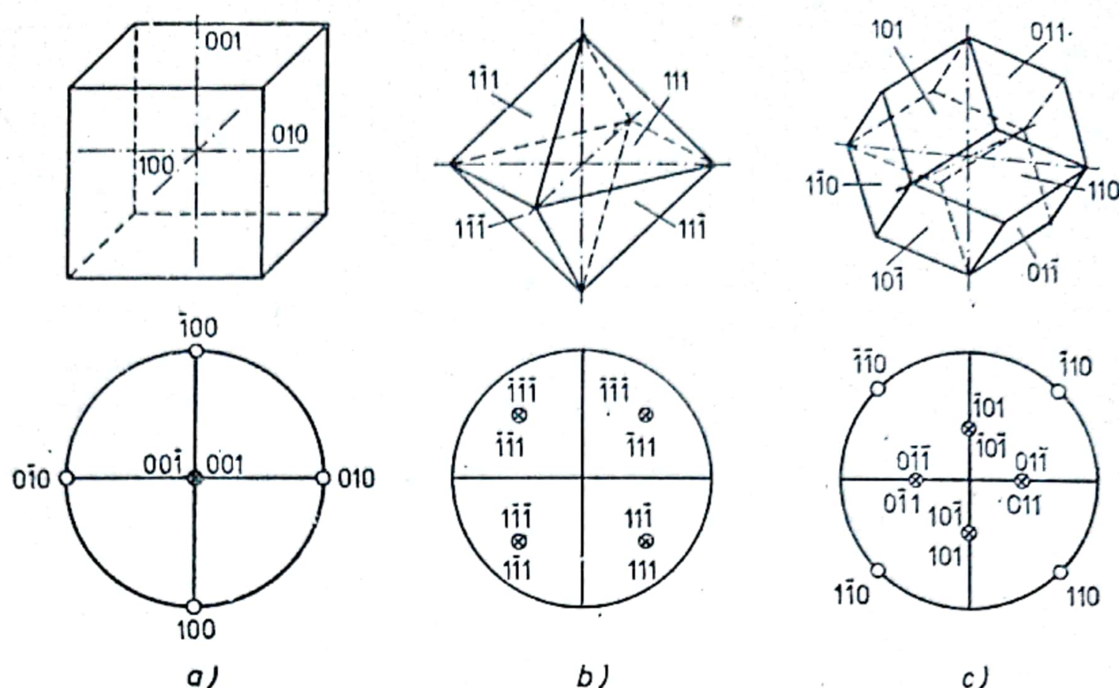


Fig. 14.1. Cele trei forme simple ale clasei *m3m* : cubul (*a*), octaedrul (*b*) și dodecaedrul rombic (*c*) și ansamblul elementelor lor de simetrie (pentru simplificarea desenului indicii fețelor sînt scriși fără paranteze).

adică totalitatea fețelor simetric echivalente ale poliedrului. În clasa *m3m* acest poliedru este un cub (fig. 14.1).

Se numește *formă simplă* poliedrul ale cărui fețe, toate, pot fi aduse în coincidență una cu alta, prin aplicarea transformărilor de simetrie proprii cristalului dat.

Aplicînd aceleași transformări simetrice ale clasei *m3m* direcției [100] din rețea, obținem [$\bar{1}00$], [010], [$0\bar{1}0$], [001] și [$00\bar{1}$], adică orientările pozitive și negative ale axelor de coordonate. Vom nota totalitatea direcțiilor simetric echivalente cu simbolul ⟨100⟩. Dacă [100] este o muchie a poliedrului, atunci ⟨100⟩ este totalitatea muchiilor simetric echivalente sau forma simplă a muchiilor. În clasa *m3m* acestea sînt muchiile cubului. Dacă [100] este un șir al rețelei, atunci ⟨100⟩ va fi simbolul axelor de coordonate și al tuturor direcțiilor paralele cu ele (fig. 14.2).

În exemplul de mai sus, planul inițial, (100), are o poziție particulară și anume, el se află la ieșirea axei 4, adică a elementului cu cea mai înaltă simetrie din clasa *m3m*. Să luăm acum fața inițială în celelalte poziții particulare : la ieșirea axei 3 vom obține opt fețe simetric echivalente ale octaedrului {111}, iar la ieșirea axei 2, douăsprezece fețe ale dodecaedrului rombic, {110}. Luînd fața inițială în cea mai generală poziție, astfel încît ea să nu coincidă cu nici un element de simetrie și să fie înclinată sub diferite unghiuri față de toate cele trei axe de coordonate, obținem forma simplă cea mai bogată a clasei *m3m* — poliedrul cu patru zeci și opt de fețe (fig. 14.3).

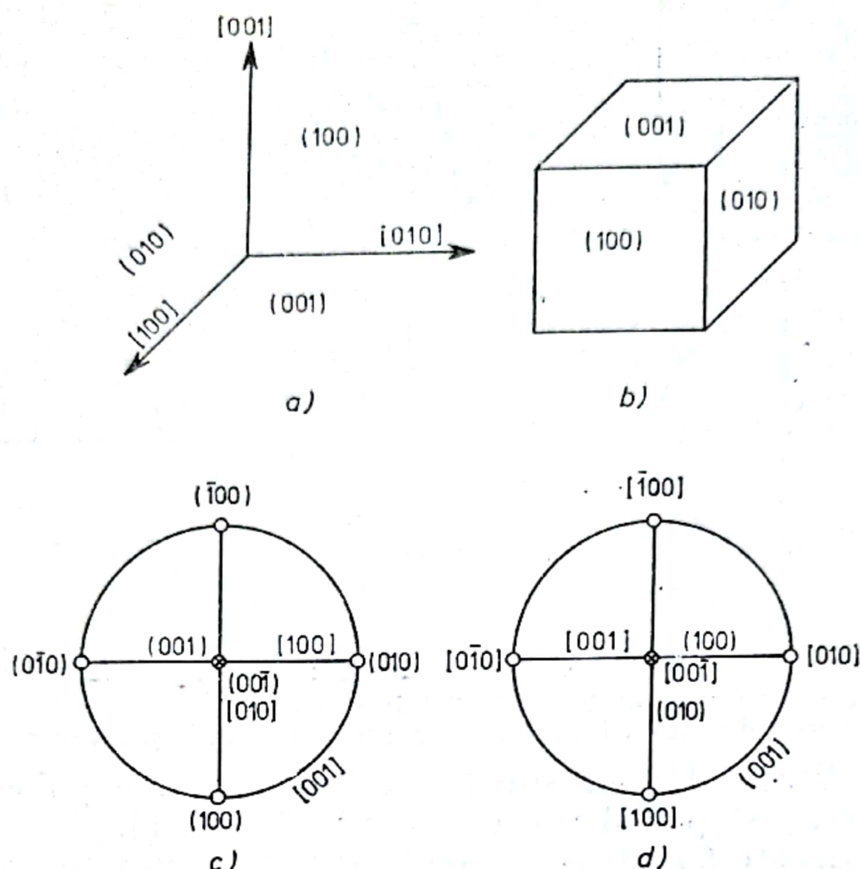


Fig. 14.2. Cele trei moduri de reprezentare a planurilor și direcțiilor simetric echivalente : complex de planuri și direcții care se intersectează într-un punct (*a*), fețe și muchii ale unei forme simple (*b*), proiecție stereografică (*c*) și proiecție gnomostereografică (*d*).

Fiecărei clase de simetrie îi corespunde o singură formă generală și cîteva forme particulare simple, adică poliedre formate din fețe identice, care se transformă una în cealaltă prin operațiile de simetrie ale acestei clase. Clasa *m*3*m* este clasa cu cea mai înaltă simetrie. Ea abundă și în forme simple. Numărul de fețe ale formelor sale simple este respectiv de : 48 $\{hkl\}$; 24 $\{hhl\}$, $\{hk0\}$; 12 {110} ; 8 {111} ; 6 {100}. În clasa cel mai puțin simetrică a singoniei cubice, clasa 23, numărul de fețe ale formelor simple este respectiv de : 12 $\{hkl\}$, $\{hhl\}$, $\{hk0\}$, {110} ; 6 {110} ; 4 {111}.

Clasele cu simetrie mai joasă au și o varietate de forme simple mai restrînsă. Clasei *m* a sistemului monoclinic îi corespunde forma generală a diedrului $\{hkl\}$, adică două fețe paralele și o singură formă particulară, constînd dintr-o singură față — monoedrul {100}, sau {010}, iar în clasa 1 există numai o singură formă simplă — monoedrul (fig. 14.4).

Formele simple pot fi închise, adică forme ce închid spațiul, cum sînt cubul, octaedrul, și deschise, ca prismele, piramidele,

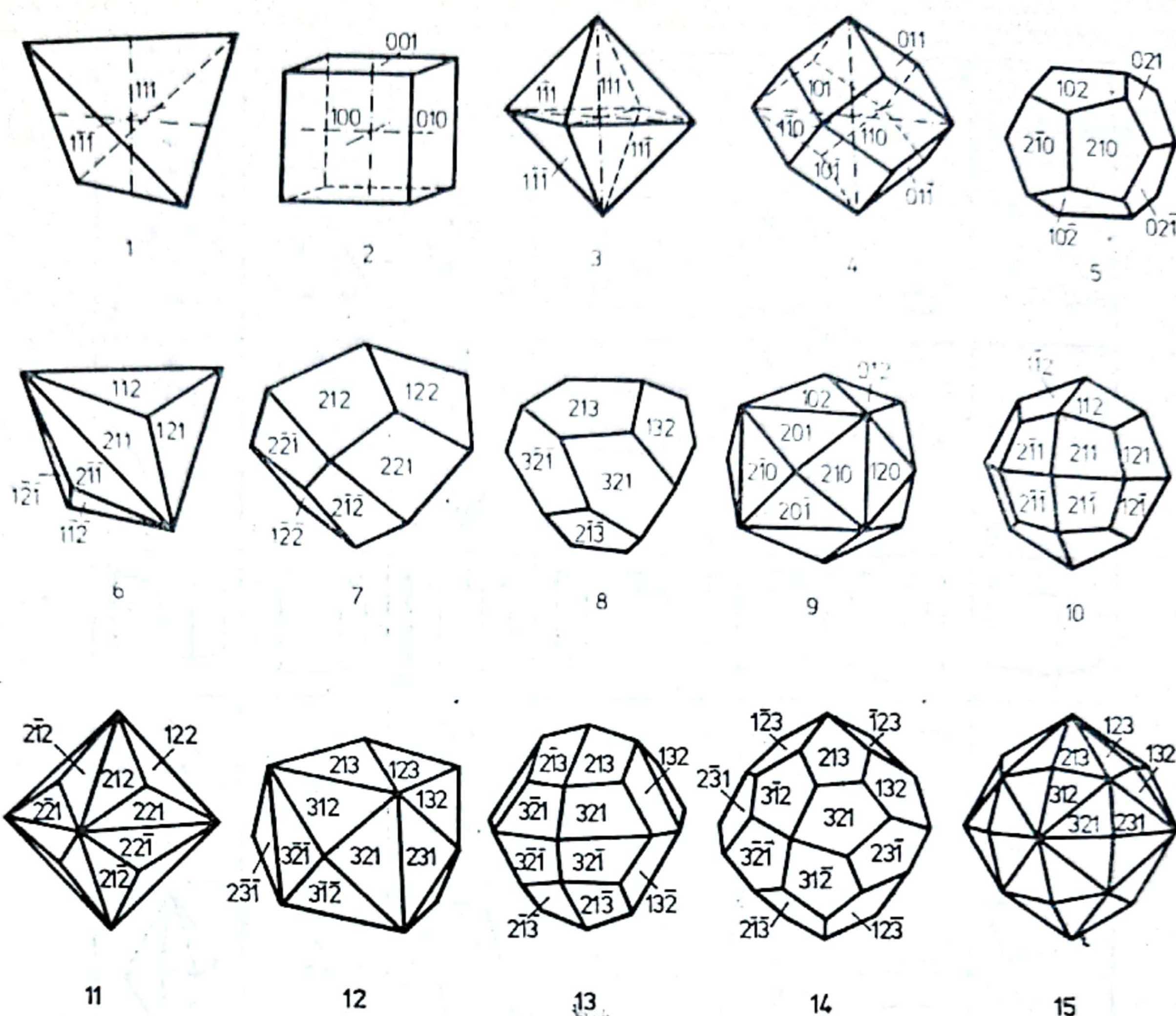


Fig. 14.3. Formele simple ale categoriei superioare: 1 — tetraedrul; 2 — cubul; octaedrul; 4 — dodecaedrul rombic; 5 — pentagondodecaedrul; 6 — trigontritetraedrul; 7 — tetragontritetraedrul; 8 — pentagontritetraedrul; 9 — cubul piramidal; 10 — tetragontrioctaedrul; 11 — trigontrioctaedrul; 12 — hexatetraedrul; 13 — — didodecaedrul; 14 — pentagontrioctaedrul; 15 — poliedrul cu patru zeci și opt de fețe (pentru simplicarea desenului indicii fețelor sînt scriși fără paranteze).

pinacoizii. Formele reale de creștere a cristalelor sînt, de obicei, combinații ale cîtorva forme simple. Formele deschise pot fi întîlnite numai în combinații. În timp ce combinațiile pot fi dintre cele mai diferite, iar numărul lor, oricît de mare, există în total numai 47 de forme simple (Boldîrev, 1936). Toate aceste forme sînt cuprinse în tabelele 14.1 și 14.2 și în figurile 14.3 și 14.4.

Sensul unui simbol al unei forme simple depinde de clasa de simetrie căreia îi aparține și de alegerea sistemului de coordonate cristalografice. De exemplu, în clasa $m3m$, în simbolul {100} permutările dau cele șase planuri ale cubului, pe cînd în clasa $2/m$, într-un același simbol, {100}, este posibilă numai o singură permutare: (100) și ($\bar{1}00$), adică în total numai două planuri.

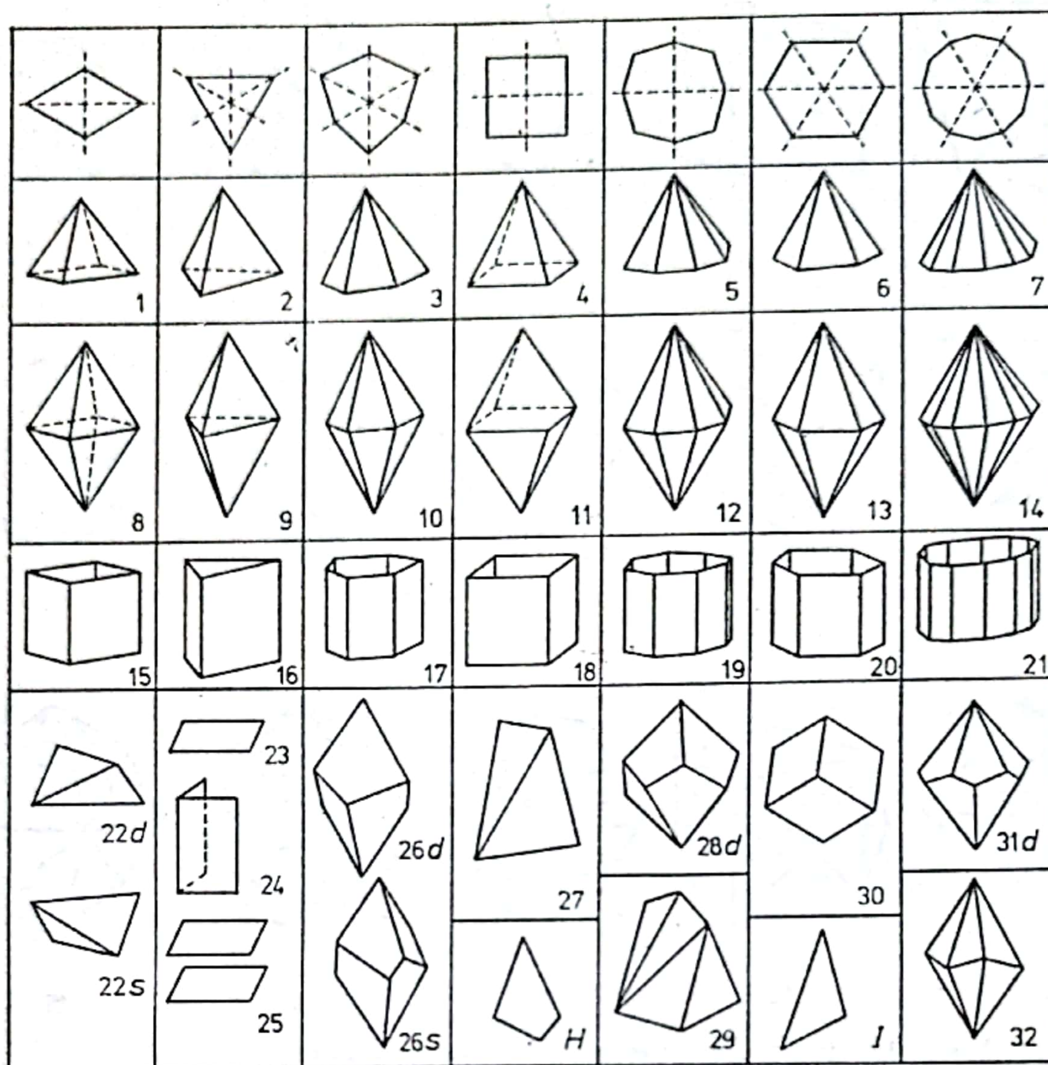


Fig. 14.4. Formele simple ale categoriilor inferioară și medie. Primul rînd de sus — secțiunile formelor simple: romb, trigon, ditrigon, tetragon, ditetragon, hexagon, dihexagon; 1 — 7 — piramide; 8 — 14 — dipiramide; 15 — 21 — prisme; 1, 8, 15 — rombice, 2, 9, 16 — trigonale, 3, 10, 17 — ditrigonale, 4, 11, 18 — tetragonale, 5, 12, 19 — ditetragonale, 6, 13, 20 — hexagonale, 7, 14, 21 — dihexagonale, 22d și 22s — tetraedri rombici drept și respectiv, stîng 23 — monoedru, 24 — diedru, 25 — pinacoid, 26d și 26s — trapezoedri trigonali drept și, respectiv, stîng, 27 — tetraedru tetragonal, 28d — trapezoedru tetragonal drept, *H* — forma unei fețe de trapezoedru, 29 — scalenoedru tetragonal, 30 — romboedru, 31d — trapezoedru hexagonal drept, 32 — scalenoedru ditrigonal, *I* — forma unei fețe a scalenoedrului.

Importanța unei forme simple este dată de numărul fețelor ei. Importanța formei simple generale a unui grup punctual dat este egală cu ordinul, sau multiplicitatea grupului punctual, adică cu numărul total de puncte echivalente, care se pot obține dintr-un singur punct prin intermediul tuturor transformărilor de simetrie ce intră în grupul punctual considerat. Dintre cele 32 de grupuri punctuale, cel mai înalt ordin îl are grupul $m3m$: multiplicitatea lui este 48. Numărul punctelor echivalente din proiecția

Tabelul 14.1

Formele simple posibile și simbolurile lor în cristalele sistemului cubic
(cifrele cursive din tabel înseamnă numărul de ordine al formelor simple din figura 14.3)

Simbolul	Clasa				
	23	$m3$	432	$\bar{4}3m$	$m3m$
hkl	*8*	*13*	*14*	*12*	*15*
hhl $(h>l)$	*7*	*11*		*7*	*11*
hhl $(h>l)$	*6*	*9*		*6*	*9*
$hk0$	*5*		*12*		
111	*1*	*3*		*1*	*3*
110	*4*				
100	*2*				

Tabelul 14.2

Formele simple posibile și simbolurile lor în cristalele categoriilor medie și inferioară
(cifrele cursive din tabel înseamnă numărul de ordine al formelor simple din figura 14.4)

Sistemul triclinic: clasa 1 — *23*; clasa $\bar{1}$ — *25*

Sistemul monoclinic

Simbolul	Clasa		
	2	m	$2/m$
hkl	*24*		*15*
$h0l$	*25*	*23*	*25*
010	*23*	*25*	

Sistemul rombic

Simbolul	Clasa		
	222	$mm2$	mmm
hkl	*22*	*1*	*8*
$hk0$	*15*		
$0kl$	*15*	*24*	*15*
100, 010	*25*		
001	*25*	*23*	

Sistemul triclinic

Simbolul	Clasa				
	3	$\bar{3}$	32	$3m$	$\bar{3}m$
$hkil$	*2*	*30*	*26*	*10*	*32*
$h0\bar{h}l$			*30*	*2*	*30*
$hh\overline{2h}l$			*9*	*6*	*13*
$hki0$	*16*	*20*	*17*		*21*
$10\bar{1}0$			*20*	*16*	*20*
$11\bar{2}0$			*16*	*20*	
0001	*23*	*25*		*23*	*25*

Tabelul 14.2 (continuare)

Sistemul hexagonal

<table>
<tr><th rowspan="2">Simbolul</th><th colspan="7">Clasa</th></tr>
<tr><th>6</th><th>$\bar{6}$</th><th>$6/m$</th><th>622</th><th>$6mm$</th><th>$\bar{6}m2$</th><th>$6/mmm$</th></tr>
<tr><td>$hkil$</td><td rowspan="3">6</td><td rowspan="3">9</td><td rowspan="3">13</td><td>31</td><td>7</td><td>10</td><td rowspan="3">13</td></tr>
<tr><td>$h0\bar{h}l$</td><td colspan="2" rowspan="2">13</td><td>9</td></tr>
<tr><td>$hh\overline{2h}l$</td><td>13</td></tr>
<tr><td>$hki0$</td><td rowspan="3">20</td><td rowspan="3">16</td><td rowspan="3">20</td><td colspan="2">21</td><td>17</td><td>21</td></tr>
<tr><td>$10\bar{1}0$</td><td colspan="4">20</td></tr>
<tr><td>$11\bar{2}0$</td><td colspan="2">20</td><td>16</td><td>20</td></tr>
<tr><td>0001</td><td>23</td><td colspan="2">25</td><td colspan="2">23</td><td colspan="2">25</td></tr>
</table>

Sistemul tetragonal

<table>
<tr><th rowspan="2">Simbolul</th><th colspan="7">Clasa</th></tr>
<tr><th>4</th><th>$\bar{4}$</th><th>$4/m$</th><th>422</th><th>$4mm$</th><th>$\bar{4}2m$</th><th>$4/mmm$</th></tr>
<tr><td>hkl</td><td rowspan="3">4</td><td rowspan="3">27</td><td rowspan="3">12</td><td>28</td><td>5</td><td>29</td><td>12</td></tr>
<tr><td>hhl</td><td rowspan="2">11</td><td rowspan="2">4</td><td>27</td><td>11</td></tr>
<tr><td>$h0l$</td><td colspan="2">11</td></tr>
<tr><td>$hk0$</td><td colspan="3" rowspan="3">11</td><td colspan="4">19</td></tr>
<tr><td>110</td><td colspan="4" rowspan="2">18</td></tr>
<tr><td>100</td></tr>
<tr><td>001</td><td>23</td><td colspan="3">25</td><td>23</td><td colspan="2">25</td></tr>
</table>

gnomostereografică, sau, altfel spus, numărul de fețe ale unei forme simple generale, definește ordinul grupului. Formele simple particulare corespund subgrupurilor grupului punctual dat. În fiecare dintre cele șapte sisteme cristalografice sau șase singonii există un grup de ordin superior, așa-numita *holoedrie* (clasa holoedrică de simetrie). Clasei holoedrice îi corespunde forma simplă generală cu numărul cel mai mare de fețe. Celelalte grupuri punctuale ale unui sistem sau singoniei cristalografice date sînt : așa-numitele *meriedrice* — subgrupurile grupului holoedric ; *hemiedrice* — subgrupurile de indice 2 ; *tetartoedrice* — subgrupurile de indice 4 ; *octoedrice* — subgrupurile de indice 8. Ele pot fi ordonate într-un șir, în care fiecare grup următor este un subgrup al grupului precedent și se deduce din cel holoedric prin reducerea importanței, ceea ce înseamnă și micșorarea numărului de fețe

ale formei simple generale. Hemiedria corespunde micşorării numărului de feţe de două ori, tetartoedria — de patru ori, octoedria — de opt ori. De exemplu, într-o singonie cubică grupul $m3m$ este holoedric, grupurile $m3$, 432, $\bar{4}3m$ sînt hemiedrice, grupul 23 este tetartoedric. Numărul de feţe din formele simple generale ale claselor meriedrice este respectiv de 1/2, 1/4, sau 1/8 din numărul de feţe ale formei holoedrice generale.

În categoriile medie şi inferioară reducerea numărului de feţe ale formei simple generale se poate produce ca şi cum s-ar separa jumătatea superioară de jumătatea inferioară a poliedrului; de exemplu, dipiramida, pierzîndu-şi planul de simetrie transversal se reduce la o piramidă, care, în acest caz, devine hemimorfă, axa principală devenind acum o axă polară.

Dacă sistemul hexagonal şi sistemul trigonal sînt considerate drept o singură singonie hexagonală, atunci clasa 3 va fi o octoedrie a singoniei hexagonale: numărul de feţe ale formei simple generale a clasei 3 a piramidei trigonale s-a redus de 8 ori faţă de forma simplă generală a clasei holoedrice, $6/mmm$, a dipiramidei dihexagonale. Dacă însă cele două sisteme, hexagonal şi trigonal sînt considerate separat, atunci clasa 3 va fi tetartoedria clasei $\bar{3}m$, iar clasa 6, tetartoedria clasei $6/mmm$.

Relaţiile de reciprocitate dintre grupurile punctuale şi subgrupuri sînt reprezentate schematic în figura 14.5. Grupurile unui acelaşi sistem sînt unite cu linii întrerupte groase. Astfel, grupul superior al sistemului rombic mmm include două subgrupuri: 222 şi $mm2$. Deoarece în grupul mmm cele trei axe de ordinul doi cît şi fiecare dintre ele pot deveni o axă singulară de ordinul doi în grupul $mm2$, rezultă că grupul mmm include trei subgrupuri: $mm2_x$, $mm2_y$, $mm2_z$; în figura 14.5 acest fapt este indicat printr-o linie întreruptă triplă.

Subgrup al grupului mmm este şi grupul $2/m$, care nu mai aparţine sistemului rombic, ci este grupul superior al sistemului monoclinic; legătura dintre ele este marcată printr-o linie subţire. Sînt, de fapt, trei linii fine, corespunzătoare celor trei direcţii posibile ale axei 2: 2_x, 2_y, 2_z.

Grupul $2/m$ include, la rîndul său, două grupuri ale sistemului monoclinic, 2 şi m, care pot fi ordonate în şiruri astfel: $2/m \supset 2 \supset 1$, $2/m \supset m \supset 1$. Pe lîngă aceasta, şirul $2/m \supset \bar{1} \supset 1$ arată că tot subgrupuri ale grupului $2/m$ sînt şi grupurile sistemului triclinic.

O atenţie deosebită trebuie acordată legăturii dintre grupurile sistemelor cubic şi trigonal: $m3m \supset \bar{3}m$, $432 \supset 32$, $\bar{4}3m \supset 3m$, $m3 \supset \bar{3}$ şi $23 \supset 3$. Ele nu apar prea clar în modelul standard de aranjare a cristalelor, dar devin perfect evidente, dacă pe axa Z

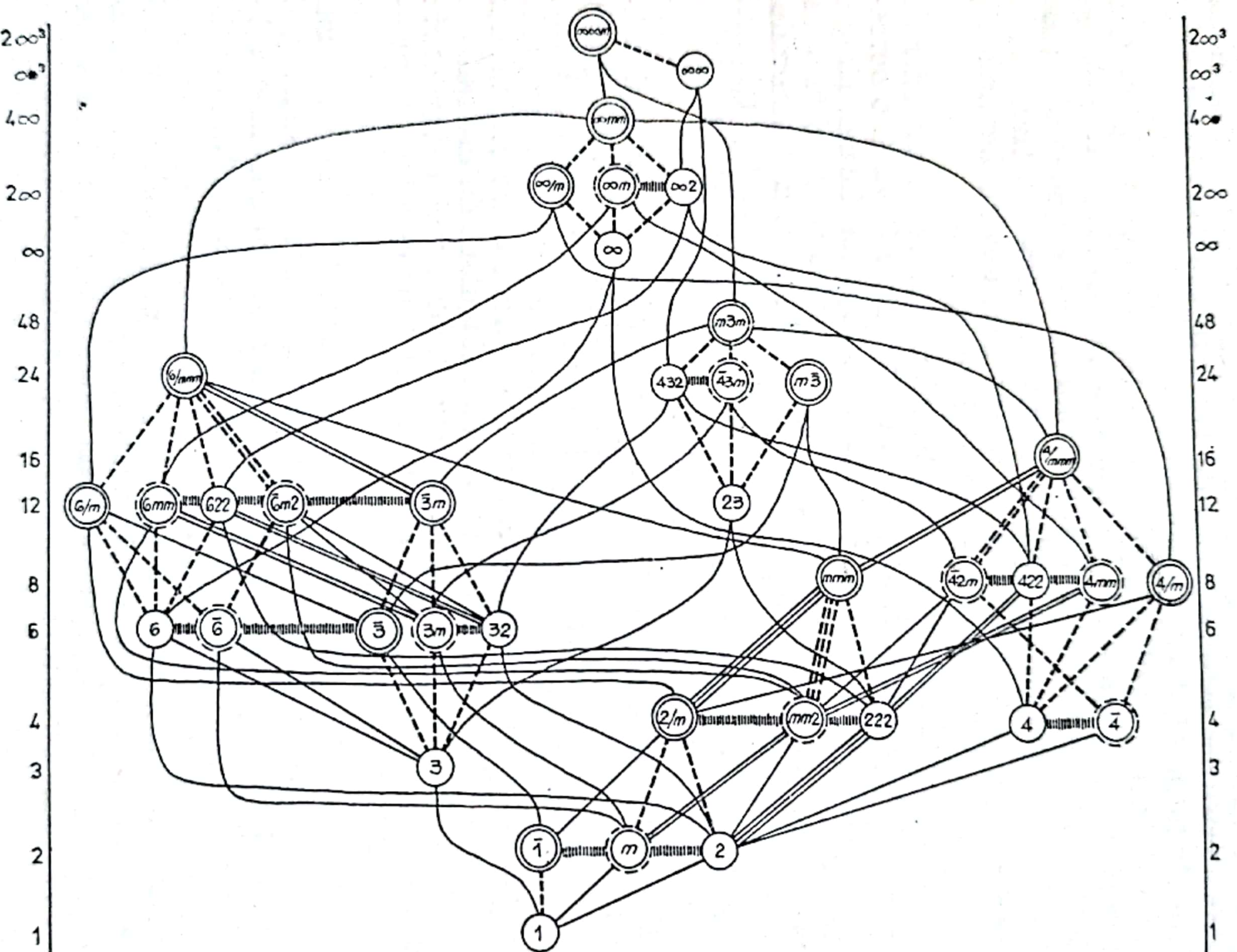


Fig. 14.5. Corelațiile dintre grupurile ș subgrupurile punctuale de simetrie.

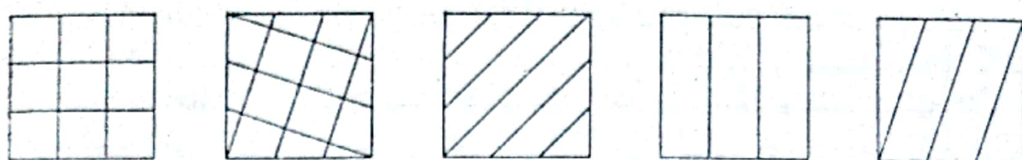


Fig. 14.6. Simetria fețelor celor cinci cuburi cristalografice diferite (după A. V. Șubnikov).

se trasează direcția [111] a cristalului cubic, iar pe axa X, direcția [$\bar{1}\bar{1}0$]. Liniile punctate orizontale leagă grupurile izomorfe.

În stînga și în dreapta figurii 14.5 sînt notate multiplicitățile fiecărui subgrup. Cu ajutorul acestui desen se poate afla deodată numărul de fețe atît al formei generale simple, cît și al celei particulare fiecărei clase de simetrie.

Fiecărei clase de simetrie îi corespunde o singură formă generală, însă cîteva forme particulare. La rîndul ei, o formă particulară poate fi întîlnită în cîteva clase de simetrie. Așa, de exemplu, în toate clasele sistemului cubic se poate genera un cub. Dacă se consideră poliedrele nu numai ca figuri geometrice, ci ca figuri materiale, cu proprietăți fizice bine determinate, avînd, în particular, o simetrie diferită a fețelor, atunci ne putem da seama că figuri geometric identice pot fi diferite din punct de vedere cristalografic, dacă ele se deosebesc prin elementele de simetrie sau prin poziția acestor elemente în raport cu fața.

În fiecare dintre cele cinci clase ale sistemului cubic, cubul se obține ca formă particulară, dacă se ia fața inițială în centrul proiecției. În acest caz se obține însă o aranjare diferită, în raport cu fețele cubului, a elementelor de simetrie existente, și deci va fi diferită și simetria feței însăși. A. V. Șubnikov a propus să se reprezinte, pentru a fi mai intuitiv, cinci cuburi cristalografice diferite, hașurînd diferit fețelor lor (fig. 14.6) (v. Șubnikov, Flint, Boki — 1940). Din aceste hașuri se vede că cele cinci figuri geometrice complet identice pot avea atît o simetrie complet diferită a fețelor cît și o simetrie diferită a proprietăților fizice. Mai mult încă, în clasele 23 și 432 cuburile pot fi și enantiomorfe (fig. 14.7).

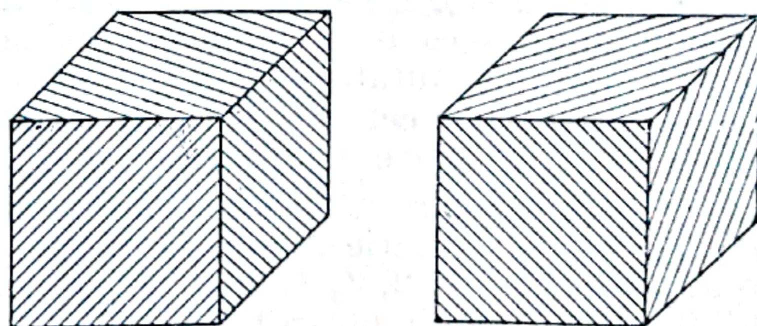


Fig. 14.7. Cuburile drept și stîng, din clasa 23.

Deosebirile cristalografice dintre formele geometric identice sînt pe deplin reale. Ele se pot face vizibile după denivelările neregulate de creștere, după hașurile fețelor naturale ale cristalului sau după figurile care apar prin corodare, adică după micile scobituri, care fac să apară mici fețe cristalografice pe fețele cristalului, prin acțiunea unui solvent activ. Figurile ce apar prin corodare se formează în locurile în care pe suprafața cristalului apare un defect oarecare de construcție cristalografică, în special dislocații. În funcție de forma figurii de coroziune se poate stabili simetria reală a feței.

G. B. Boki a demonstrat că numărul tuturor formelor cristalografice simple diferite ale cristalelor este egal cu 146, iar dacă se mai ține cont încă și de diferența dintre formele drepte și cele stîngi, atunci acest număr devine 193 (Boki, 1940). I. I. Șafranovski a dedus 1403 varietăți structurale ale acelorași forme simple, care se deosebesc prin simetria infinită, adică după elementele de simetrie ale grupurilor spațiale (Șafranovski, 1968).

Pe lîngă forma simplă (sau poliedrică) a feței, un cristal mai poate fi caracterizat prin formele vîrfurilor și ale muchiilor. Forma simplă de vîrfuri o constituie totalitatea vîrfurilor unui cristal, care se obțin unul din altul cu ajutorul tuturor operațiilor de simetrie, iar forma simplă de muchie este o aceeași totalitate a muchiilor.

Fasciculul simplu tridimensional de muchii este totalitatea muchiilor legate prin elemente de simetrie ale unei anumite clase, care sînt translate paralel cu ele însele, într-un punct origine. Astfel, în clasa $m3m$ simbolul $\langle 100 \rangle$ înseamnă atît totalitatea muchiilor unui cub, cît și complexul axelor 4; fasciculul direcțiilor axelor 3 are simbolul $\langle 111 \rangle$. Proiecția stereografică a formei simple de muchii coincide cu proiecția gnomostereografică a formei simple de fețe.

Într-un mediu izotrop, optic inactiv, orice direcție nepolară, neaxială, nu este singulară; ea prezintă cea mai înaltă simetrie, fiind descrisă de grupul de simetrie ∞/mm, adică de simetria unui cilindru infinit, imobil. Într-un cristal, simetria oricărei direcții poate fi determinată studiind, conform principiului Curie, superpoziția elementelor de simetrie ale cristalului și ale unui cilindru orientat după acea direcție, a cărei simetrie se caută (Jeludev, 1971). Simetria căutată a direcției este definită ca fiind grupul comun de ordinul cel mai înalt al ambelor grupuri, care corespunde orientării date a cristalului și cilindrului.

Direcțiile polare sînt subordonate grupului ∞m, adică simetriei conului de rotație mobil. Grupului ∞m îi sînt subordonate 10 clase polare: 1, 2, 3, 4, 6 m, $mm2$, $3m$, $4mm$, $6mm$. În aceste clase există direcții polare singulare. Direcțiile polare singulare

pot exista în toate clasele fără centru, printre care clasele polar-neutre, 222, 23, $\bar{6}$, $\bar{6}m2$, 622, $\bar{4}$, $\bar{4}2m$, 422, $\bar{4}3m$, 432.

Direcţiile axiale sînt descrise de grupurile subordonate grupului de simetrie ∞/m : 1, 2, 3, 4, 6, m, $2/m$, $\bar{6}$, $4/m$, $6m$, $\bar{1}$, $\bar{4}$, $\bar{3}$. Astfel de direcţii sînt posibile în toate cristalele.

Direcţiile nepolare există în 30 de clase; ele nu există numai în clasele 1 şi 3. În clasa 1 toate direcţiile singulare sînt polare. În clasa 3, axa 3 este singulară, polară, toate celelalte direcţii fiind simple, polare.

§ 15. UNELE PROBLEME ALE CRISTALOGRAFIEI GEOMETRICE

Legătura dintre indicii Miller ai feţelor şi ai muchiilor şi vectorii normali la feţe sau după direcţiile muchiilor permite reducerea multor probleme cristalografice la probleme pur geometrice. Să examinăm unele dintre aceste probleme.

Problema 1. Poate o direcţie $[l^1l^2l^3]$ să fie o muchie a feţei $(n_1n_2n_3)$? Pentru ca direcţia dată, $\boldsymbol{l}$, să poată fi o muchie a feţei ea trebuie să fie paralelă cu această faţă şi, prin urmare, perpendiculară la normala $\boldsymbol{n}$ a feţei. Condiţia de ortogonalitate a doi vectori este ca produsul lor scalar să fie nul

$$\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{n} = 0. \tag{15.1}$$

Deoarece

$$\boldsymbol{l} = l^1\boldsymbol{a}_1 + l^2\boldsymbol{a}_2 + l^3\boldsymbol{a}_3, \tag{15.2}$$

$$\boldsymbol{n} = n_1\boldsymbol{a}^1 + n_2\boldsymbol{a}^2 + n_3\boldsymbol{a}^3,$$

această condiţie se transcrie în forma

$$(l^1\boldsymbol{a}_1 + l^2\boldsymbol{a}_2 + l^3\boldsymbol{a}_3)\cdot(n_1\boldsymbol{a}^1 + n_2\boldsymbol{a}^2 + n_3\boldsymbol{a}^3) = 0. \tag{15.3}$$

Vom face înmulţirea scalară, termen cu termen, ţinînd cont că

$$\boldsymbol{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{a}^\beta = \delta^\beta_\alpha. \tag{15.4}$$

Numai trei dintre cei nouă termeni nu sînt identic nuli, aşa că obţinem, în final

$$l^1n_1 + l^2n_2 + l^3n_3 = 0. \tag{15.5}$$

Direcţia $[l^1l^2l^3]$ poate fi o muchie a feţei $(n_1n_2n_3)$ în cazul, şi numai în cazul, în care este satisfăcută condiţia (15.5). Această relaţie poate fi dedusă mult mai rapid folosind consecvent scrierea prescurtată. În locul dezvoltării (15.2) scriem

$$\boldsymbol{l} = l^\alpha \boldsymbol{a}_\alpha, \quad \boldsymbol{n} = n_\beta \boldsymbol{a}^\beta, \tag{15.6}$$

iar în locul condiţiei (15.3)

$$l^\alpha \boldsymbol{a}_\alpha \cdot n_\beta \boldsymbol{a}^\beta = 0. \tag{15.7}$$

Utilizăm acum formula (15.4). Atunci, în loc de (15.7), se poate scrie

$$l^\alpha n_\beta \delta_\alpha^\beta = 0. \tag{15.8}$$

Să calculăm expresia $n_\beta \delta_\alpha^\beta$. Conform definiţiei

$$n_\beta \delta_\alpha^\beta = n_1 \delta_\alpha^1 + n_2 \delta_\alpha^2 + n_3 \delta_\alpha^3. \tag{15.9}$$

În această sumă numai un termen este diferit de zero; care anume este el depinde de valoarea indicelui α. Dacă, de exemplu,

$$\alpha = 1,$$

atunci

$$\delta_\alpha^1 = \delta_1^1 = 1,$$

iar

$$\delta_\alpha^2 = \delta_1^2 = 0,$$

şi

$$\delta_\alpha^3 = \delta_1^3 = 0.$$

Astfel, în acest caz, este diferit de zero (şi egal cu n_1) numai primul termen al sumei (15.9)

$$n_\beta \delta_1^\beta = n_1.$$

Dacă

$$\alpha = 2,$$

atunci singurul termen diferit de zero în această sumă va fi cel de al doilea, deoarece

$$\delta_2^1 = \delta_3^2 = 0,$$

iar

$$\delta_2^2 = 1,$$

prin urmare,

$$n_\beta \delta_2^\beta = n_2.$$

Analog ne convingem că

$$n_\beta \delta_3^\beta = n_3.$$

Evident, aceste trei egalități pot fi înlocuite cu o singură egalitate,

$$n_\beta \delta_\alpha^\beta = n_\alpha, \qquad (15.10)$$

în care indicele α poate căpăta oricare dintre cele trei valori posibile. Exact la fel s-ar fi putut arăta că

$$l^\alpha \delta_\alpha^\beta = l^\beta. \qquad (15.11)$$

Relațiile obținute, (15.10) și (15.11), permit enunțarea următoarei reguli generale: cînd o anumită mărime se însumează după simbolurile Kronecker, rezultatul nu se modifică dacă simbolul lui Kronecker nu se scrie deloc, iar la mărimea însumată cu el se înlocuiește indicele de însumare cu indicele liber al simbolului Kronecker.

Utilizînd oricare dintre formulele (15.10) sau (15.11) pentru simplificarea egalității (15.8), obținem soluția problemei. Substituind în (15.8) expresia (15.10), obținem

$$l^\alpha n_\alpha = 0. \qquad (15.12)$$

Aceasta este scrierea concisă a soluției (15.5), obținută mai înainte. În (15.8) se poate substitui expresia (15.11). Atunci obținem

$$l^\beta n_\beta = 0,$$

ceea ce este aceeași sumă; modificarea indicilor de însumare, așa cum s-a remarcat deja, nu are nici o importanță.

Grafic, această problemă se rezolvă ușor cu ajutorul proiecției stereografice: direcția $[l^1 l^2 l^3]$ poate fi o muchie a feței $(n_1 n_2 n_3)$ dacă punctul care reprezintă direcția se află pe cercul mare, care reprezintă planul. Soluția poate fi obținută și cu ajutorul proiecției gnomostereografice: cercul mare, care reprezintă direcția $[l^1 l^2 l^3]$, trebuie să treacă prin punctul care reprezintă planul $(n_1 n_2 n_3)$.

Problema 2. Să se găsească muchia după care se intersectează fețele $(n_1n_2n_3)$ **și** $(m_1m_2m_3)$. Muchia căutată se află pe ambele fețe. De aceea, vectorul $\boldsymbol{l}$, care o definește, este perpendicular pe normalele $\boldsymbol{n}$ și $\boldsymbol{m}$ ale ambelor fețe. Ne amintim că aceasta este tocmai o proprietate a produsului vectorial al celor doi vectori: acesta este un vector perpendicular pe fiecare dintre factori. Vom folosi produsul vectorial înmulțit cu volumul celulei cristalografice, v (desigur, înmulțirea unui vector cu o cantitate pozitivă nu schimbă direcția vectorului)

$$\boldsymbol{l} = v\,\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{m}. \tag{15.13}$$

Ordinea factorilor nu contează în acest caz, dat fiind că direcția muchiei se determină totuna, cu o precizie de pînă la semn. Să calculăm acest produs vectorial, avînd în vedere că

$$\boldsymbol{n} = n_1\boldsymbol{a}^1 + n_2\boldsymbol{a}^2 + n_3\boldsymbol{a}^3, \ \boldsymbol{m} = m_1\boldsymbol{a}^1 + m_2\boldsymbol{a}^2 + m_3\boldsymbol{a}^3.$$

Înlocuim această expresie în (15.13)

$$\boldsymbol{l} = v(n_1\boldsymbol{a}^1 + n_2\boldsymbol{a}^2 + n_3\boldsymbol{a}^3) \times (m_1\boldsymbol{a}^1 + m_2\boldsymbol{a}^2 + m_3\boldsymbol{a}^3).$$

Vom înmulți vectorial, termen cu termen, ținînd cont că produsul vectorial al fiecărui vector cu el însuși este nul și că prin schimbarea ordinii factorilor produsului vectorial, acesta își schimbă semnul. Atunci obținem

$$\boldsymbol{l} = v([n_2m_3 - n_3m_2)\,\boldsymbol{a}^2 \times \boldsymbol{a}^3 + (n_3m_1 - n_1m_3)\boldsymbol{a}^3 \times \boldsymbol{a}^1 +$$

$$+ (n_1m_2 - n_2m_1)\boldsymbol{a}^1 \times \boldsymbol{a}^2].$$

Însă produsele vectoriale ale vectorilor bazei rețelei reciproce, înmulțite cu volumul celulei cristalografice, sînt egale, așa cum s-a calculat în § 11, cu vectorii bazei rețelei directe (tocmai pentru aceasta se și introduce factorul v). Ținînd cont de formula (11.6), găsim relația

$$\boldsymbol{l} = (n_2m_3 - n_3m_2)\boldsymbol{a}_1 + (n_3m_1 - n_1m_3)\boldsymbol{a}_2 + (n_1m_2 - n_2m_1)\boldsymbol{a}_3. \tag{15.14}$$

Deoarece numerele n_α și m_α sînt numere întregi, coeficienții vectorilor bazei vor fi, de asemenea, numere întregi; evident, ei sînt tocmai indicii Miller căutați ai muchiei $[l^1l^2l^3]$

$$l^1 = n_2m_3 - n_3m_2, \quad l^2 = n_3m_1 - n_1m_3, \quad l^3 = n_1m_2 - n_2m_1. \tag{15.15}$$

Prin utilizarea simbolurilor Levi-Civita (v. § 13), vom scrie formula (15.13) sub forma

$$\boldsymbol{l} = v\, n_\alpha \boldsymbol{a}^\alpha \times m_\beta \boldsymbol{a}^\beta, \tag{15.16}$$

iar cu ajutorul identității (13.10), obținem

$$\boldsymbol{l} = \delta^{\alpha\beta\gamma} n_\alpha m_\beta \boldsymbol{a}_\gamma$$

de unde

$$l^\gamma = \delta^{\gamma\alpha\beta} n_\alpha m_\beta. \tag{15.17}$$

Această formulă este foarte ușor de folosit, dacă remarcăm că fixînd unul dintre indici, lăsăm pentru valorile celorlalți doi indici doar numai două posibilități. Astfel, dacă $\gamma = 1$, atunci sînt diferiți de zero numai $\delta^{123} = 1$ și $\delta^{132} = -1$. Deci,

$$l^1 = \delta^{1\alpha\beta} n_\alpha m_\beta = \delta^{123}\, n_2 m_3 + \delta^{132}\, n_3 m_2 = n_2 m_3 - n_3 m_2,$$

ceea ce coincide cu prima dintre formulele (15.15).

Pentru rezolvarea problemei 2 se utilizează adesea următoarea regulă mnemotehnică simplă: scriem indicii fețelor $(n_1 n_2 n_3)$ și $(m_1 m_2 m_3)$ pe două linii și efectuăm înmulțirea încrucișat.

$$\begin{array}{c|ccccc|c} n_1 & n_2 & n_3 & n_1 & n_2 & & n_3 \\ & \times & \times & \times & & & \\ m_1 & m_2 & m_3 & m_1 & m_2 & & m_3. \end{array}$$

În proiecția gnomostereografică problema 2 se poate rezolva ușor cu ajutorul rețelei Wulf: rotind rețeaua în jurul centrului proiecției se găsește arcul de cerc mare, care poate fi făcut să treacă prin cele două puncte care corespund proiecțiilor fețelor date.

Problema 3. Să se găsească fața căreia îi aparțin muchiile $[l^1 l^2 l^3]$ **și** $[k^1 k^2 k^3]$. Raționînd ca și în cazul problemei 2, deducem că normala $\boldsymbol{n}$ la fața necunoscută este perpendiculară pe ambele muchii. Vom căuta direcția ei tot sub formă de produs vectorial, de data aceasta însă nu înmulțit, ci împărțit la volumul celulei elementare

$$\boldsymbol{n} = \frac{1}{v} \boldsymbol{l} \times \boldsymbol{k}. \tag{15.18}$$

Înlocuim aici expresiile dezvoltate ale vectorilor $\boldsymbol{l}$ și $\boldsymbol{k}$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{l} &= l^1\boldsymbol{a}_1 + l^2\boldsymbol{a}_2 + l^3\boldsymbol{a}_3 = l^\alpha\boldsymbol{a}_\alpha, \\ \boldsymbol{k} &= k^1\boldsymbol{a}_1 + k^2\boldsymbol{a}_2 + k^3\boldsymbol{a}_3 = k^\alpha\boldsymbol{a}_\alpha \end{aligned} \tag{15.19}$$

și, exact ca și în problema precedentă, facem înmulțirea vectorială, termen cu termen. Produsele vectoriale ale vectorilor bazei împărțite prin volumul celulei cristalografice sînt egale cu vectorii bazei rețelei reciproce. Obținem deci

$$\boldsymbol{n} = (l^2k^3 - l^3k^2)\boldsymbol{a}^1 + (l^3k^1 - l^1k^3)\boldsymbol{a}^2 + (l^1k^2 - l^2k^1)\boldsymbol{a}^3, \tag{15.20}$$

astfel încît indicii $(n_1n_2n_3)$ sînt dați de formulele

$$n_1 = l^2k^3 - l^3k^2,\quad n_2 = l^3k^1 - l^1k^3,\quad n_3 = l^1k^2 - l^2k^1, \tag{15.21}$$

care amintesc foarte mult de relațiile (15.15). Utilizînd simbolul Levi-Civita, obținem, analog cu formula (15.17),

$$n_\alpha = \delta_{\alpha\beta\gamma}l^\beta k^\gamma. \tag{15.22}$$

Și această problemă poate fi rezolvată efectuînd o înmulțire încrucișată, ca în problema 2.

În proiecție gnomostereografică problema 3 se rezolvă tot cu ajutorul rețelei Wulf: intersecția celor două arce ale cercurilor mari, care prezintă proiecțiile muchiilor, dă punctul proiecției acelei fețe pe care se află ambele muchii.

În proiecție stereografică ultimele două probleme se rezolvă tot cu ajutorul rețelei Wulf, cu singura deosebire că proiecțiile planurilor sînt arcuri, pe cînd proiecțiile direcțiilor sînt puncte (v. § 2).

Problema 4. Cristalele hexagonale (formule de calcul în indici Bravais). Dacă sînt dați nu indicii Miller, ci indicii Bravais, atunci, în general vorbind, trebuie să se treacă la notațiile vectoriale ale planurilor și direcțiilor cristalografice (metodele de trecere au fost tratate în § 12), apoi să se rezolve problema pusă și numai după aceea să se revină la indicii Bravais. Totuși, pentru problemele care se intîlnesc cel mai des, nu este greu să se deducă formulele de calcul, direct în indici Bravais. Să transcriem trei dintre aceste formule.

Condiția ca o direcție (muchie) cu indicii Bravais $[r^1r^2r^3r^4]$ să se afle în planul (fața) avînd indicii Bravais $(p^1p^2p^3p^4)$ este de forma

$$r^1p_1 + r^2p_2 + r^3p_3 + r^4p_4 = 0. \tag{15.23}$$

Dacă indicii Bravais ai două fețe ale unui cristal sînt $(p_1p_2p_3p_4)$ și $(q_1q_2q_3q_4)$, atunci indicii Bravais ai muchiei $[r^1r^2r^3r^4]$, care este intersecția lor, sînt definiți prin raportul

$$r^1 : r^2 : r^3 : r^4 = [(p_2 - p_3)\, q_4 - (q_2 - q_3)p_4] :$$

$$: [(p_3 - p_1)q_4 - (q_3 - q_1)p_4] : [(p_1 - p_2)\, q_4 - (q_1 - q_2)p_4] :$$

$$: 3(p_1q_2 - p_2q_1). \tag{15.24}$$

Dacă indicii Bravais ai două muchii ale cristalului sînt $[r^1r^2r^3r^4]$ și $[s^1s^2s^3s^4]$, atunci indicii feței, definită de aceste muchii se vor afla între ei ca

$$p_1 : p_2 : p_3 : p_4 = [(r^2 - r^3)s^4 - (s^2 - s^3)r^4] : [(r^3 - r^1)s^4 - (s^3 - s^1)r^4] :$$
(15.25)
$$: [(r^1 - r^2)s^4 - (s^1 - s^2)r^4] : [(r^2 - r^3)(s^3 - s^1) - (s^2 - s^3)(r^3 - r^1)].$$

Problema 5. Calculul lungimii vectorului rețelelor directă și reciprocă. Utilizînd tensorul metric al rețelei, se pot rezolva și probleme mai complicate ale cristalografiei geometrice, în particular, cele legate de calculul produselor scalare. Astfel, produsul scalar a doi vectori

$$\boldsymbol{k}^1 = k^\alpha \boldsymbol{a}_\alpha$$

și

$$\boldsymbol{l} = l^\beta \boldsymbol{a}_\beta,$$

definiți prin componentele lor contravariante, k^α și l^β, este egal cu

$$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{l} = k^\alpha l^\beta \boldsymbol{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{a}_\beta.$$

Însă, conform formulei (11.1),

$$\boldsymbol{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{a}_\beta = g_{\alpha\beta},$$

prin urmare,

$$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{l} = g_{\alpha\beta} k^\alpha l^\beta. \tag{15.26}$$

De aici rezultă procedeul de calcul al lungimii unui vector dat prin componentele lui contravariante

$$l = \sqrt{\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{l}} = \sqrt{g_{\alpha\beta} l^\alpha l^\beta}. \tag{15.27}$$

Dacă vectorii sînt daţi prin componentele lor covariante, atunci în formulele analoage vor apărea acum componentele contravariante ale tensorului metric, nu cele covariante: produsul scalar al vectorilor

$$\boldsymbol{m} = m_\alpha \boldsymbol{a}^\alpha \text{ și } \boldsymbol{n} = n_\beta \boldsymbol{a}^\beta$$

este egal cu

$$\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{n} = m_\alpha n_\beta \boldsymbol{a}^\alpha \cdot \boldsymbol{a}^\beta,$$

sau

$$\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{n} = g^{\alpha\beta} m_\alpha n_\beta, \tag{15.28}$$

iar lungimea vectorului $\boldsymbol{n}$, definit prin componentele sale covariante n_α, va fi

$$n = \sqrt{g^{\alpha\beta} n_\alpha n_\beta}. \tag{15.29}$$

Dacă însă sînt cunoscute componentele covariante și cele contravariante ale vectorilor, atunci produsele scalare și lungimile se calculează și fără utilizarea tensorului metric. De exemplu,

$$\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{n} = l^\alpha n_\alpha.$$

Problema 6. Distanţele dintre planuri. Lungimea n a vectorului reţelei reciproce, $\boldsymbol{n} = n_\alpha \boldsymbol{a}^\alpha$ este inversa distanţei dintre planurile sistemului de planuri paralele $(n_1 n_2 n_3)$, legate între ele printr-o translaţie cu vectorul $\boldsymbol{n}$. Prin urmare, distanţa dintre planuri, $d(\boldsymbol{n})$, este dată de formula

$$1/d^2(\boldsymbol{n}) = g^{\alpha\beta} n_\alpha n_\beta \tag{15.30}$$

rezultată din (15.29). În cazul determinării distanţelor dintre planuri în reţelele neprimitive (centrate) se poate utiliza nu numai tensorul metric al reţelei centrate, ci și tensorul metric al reţelei primitive corespunzătoare. În ultimul caz trebuie avut în vedere că planurile care trec prin nodurile de centrare sînt date de indici Miller care pot fi simplificaţi. Astfel, în reţeaua cubică cu feţe centrate, prin nodurile de centrare trec planurile (200) și (220); distanţele corespunzătoare dintre planuri,

$$d_{(200)} = a/2,\ d_{(220)} = a\sqrt{2}/4$$

sînt, aşa cum era de aşteptat, de două ori mai mici decît distanţele analoage dintre planurile reţelei cubice simple, avînd acelaşi parametru, a,

$$d_{(100)} = a, \; d_{(110)} = a\sqrt{2}/2.$$

Problema 7. Calculul unghiurilor dintre direcţiile şi planurile cristalografice. Dacă sînt cunoscute proiecţiile acestor direcţii sau planuri, atunci problema se rezolvă uşor cu ajutorul reţelei Wulf. Distanţele unghiulare dintre două puncte de pe o sferă se măsoară pe arcele cercurilor mari. Dacă ambele puncte (ale proiecţiei direcţiilor, în proiecţie stereografică, sau ale proiecţiilor planurilor, în proiecţie gnomostereografică) se află pe aceeaşi emisferă, atunci rotind reţeaua (sau hîrtia de calc pe care este desenată proiecţia) aducem ambele puncte pe acelaşi meridian şi măsurăm unghiul pe ele. Dacă punctele se află pe emisfere diferite, atunci le aducem pe meridiane simetrice faţă de centrul reţelei şi măsurăm pe unul dintre meridiane, de la punct spre pol, iar pe celălalt meridian, de la pol spre punct.

Să rezolvăm aceeaşi problemă analitic. Direcţiilor cristalografice $[k^1k^2k^3]$ şi $[l^1l^2l^3]$ le corespund vectorii

$$\boldsymbol{k} = k^\alpha \boldsymbol{a}_\alpha$$

şi

$$\boldsymbol{l} = l^\beta \boldsymbol{a}_\beta \,;$$

cosinusul unghiului dintre ele,

$$\cos\varphi = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{l}/(kl)$$

este dat de formula

$$\cos\varphi = \frac{g_{\alpha\beta}k^\alpha l^\beta}{\sqrt{(g_{\gamma\eta}k^\gamma k^\eta)\,(g_{\xi\zeta}\;l^\xi l^\zeta)}}. \qquad (15.31)$$

Unghiul ψ dintre normalele la planurile cristalografice $(m_1m_2m_3)$ şi $(n_1n_2n_3)$ se calculează cu o formulă foarte asemănătoare

$$\cos\psi = \frac{g^{\alpha\beta}m_\alpha n_\beta}{\sqrt{(g^{\gamma\xi}m_\gamma\, m_\xi)(g^{\eta\zeta}n_\eta n_\zeta)}}. \qquad (15.32)$$

Pentru calcularea unghiului χ, dintre direcţia cristalografică $[l^1l^2l^3]$ şi normala la planul cristalografic $(n_1n_2n_3)$, este necesar, de asemenea, să fie cunoscute componentele tensorului metric

$$\cos\chi = \frac{l^\alpha n_\alpha}{\sqrt{(g_{\beta\gamma}l^\beta l^\gamma)\;\;(g^{\xi\eta}\,n_\xi\, n_\eta)}}. \qquad (15.33)$$

Pentru calcularea tuturor acestor unghiuri, nu este deloc obligatoriu să se cunoască dimensiunile celulei; este suficient să avem date exacte relativ la forma ei. Cu alte cuvinte, nu este nevoie să se cunoască toate componentele tensorului metric, ci este suficient să fie date toate rapoturile dintre ele. În particular, forma celulelor elementare ale rețelelor romboedrică și hexagonală este definită doar printr-un singur parametru. Vom examina această problemă mai detaliat.

Problema 8. Raporturile axiale. Tensorul metric romboedric al sistemului de coordonate, $g_{\alpha\beta}$, în cazul alegerii unanim acceptate a celulei elementare, are matricea

$$G = \begin{Vmatrix} b^2 & b^2\cos\alpha & b^2\cos\alpha \\ b^2\cos\alpha & b^2 & b^2\cos\alpha \\ b^2\cos\alpha & b^2\cos\alpha & b^2 \end{Vmatrix}, \qquad (15.34)$$

în care b este lungimea muchiei romboedrului elementar, iar α — unghiul din vîrful romboedrului, dintre muchiile sale vecine (v. anexa B). Evident, forma romboedrului (spre deosebire de dimensiunile lui) este determinată tocmai de unghiul α.

Tensorul metric al sistemului de coordonate hexagonal, pe care îl vom nota cu $g_{\alpha'\beta'}$ are matricea

$$G' = \begin{Vmatrix} a^2 & -a^2/2 & 0 \\ -a^2/2 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{Vmatrix}, \qquad (15.35)$$

unde a este lungimea muchiilor celulei care se află în planul bazei, iar c este lungimea muchiei paralele cu axa de simetrie principală. Forma celulei este caracterizată de raportul axial c/a.

Așa cum s-a arătat în § 13, un cristal din sistemul trigonal poate fi descris atît în sistemul de coordonate hexagonal, cît și în cel romboedric. În primul caz rețeaua lui va fi caracterizată prin raportul axial c/a, iar în al doilea, de unghiul din vîrful romboedrului, α. Să găsim relația care leagă parametrul c/a de parametrul α în cazul în care ei definesc un același cristal.

Tensorii metrici (15.34) și (15.35) sînt legați prin relația (13.23), în care $\|P^{\alpha}_{\gamma'}\|$ este matricea trecerii de la sistemul de coordonate romboedric la cel hexagonal, (13.29). Să calculăm $g_{1'1'} = a^2$ și $g_{3'3'} = c^2$. Vom transcrie detaliat calculul lui $g_{1'1'}$. Conform formulei (13.23),

$$g_{1'1'} = P^{\alpha}_{1'} P^{\beta}_{1'} g_{\alpha\beta},$$

sau, în formă dezvoltată,

$$g_{1'1'} = (P^1_{1'})^2 g_{11} + (P^2_{1'}) g_{22} + (P^3_{1'}) g_{33} +$$
$$+ 2 P^2_{1'} P^3_{1'} g_{23} + 2 P^3_{1'} P^1_{1'} g_{31} + 2 P^1_{1'} P^2_{1'} g_{12}$$

(aici este folosit faptul că tensorul este simetric). Observînd că

$$P^1_{1'} = - P^2_{1'} = 1,$$

iar

$$P^3_{1'} = 0,$$

obţinem

$$g_{1'1'} = g_{11} + g_{22} - 2 g_{1:}$$

şi, substituind valorile componentelor tensorului metric din formulele (15.34) şi 15.35), vom avea

$$a^2 = 2b^2 (1 - \cos \alpha).$$

Din relaţia

$$g_{3'3'} = P^\alpha_{3'} P^\beta_{3'} g_{\alpha\beta},$$

efectuînd calcule analoage, obţinem

$$c^2 = 3b^2 (1 + 2 \cos \alpha).$$

Aşa că, relaţia căutată va fi de forma

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{3(1 + 2 \cos \alpha)}{2(1 - \cos \alpha)}}, \quad \cos \alpha = \frac{2(c/a)^2 - 3}{2(c/a)^2 + 6}. \qquad (15.35)$$

Romboedrii se subîmpart, de obicei, în romboedri alungiţi (ascuţiţi) — cu unghiul din vîrf ascuţit — şi turtiţi (obtuzi) — cu unghiul din vîrf obtuz; legătura dintre ei o face romboedrul cu unghiul din vîrf drept, adică cubul. Lui îi corespund unghiul la vîrf $\alpha = 90°$ şi raportul axial $c/a = \sqrt{3/2} \approx 1,225$.

În afară de cub mai pot fi desemnaţi încă doi romboedri care pot servi drept celule primitive ale reţelei unui cristal din sistemul cubic: în primul rînd, romboedrul alungit cu unghiul din vîrf

$$\alpha = \arccos (1/2) = 60°,$$

căruia îi corespunde raportul axial

$$c/a = \sqrt{6} \approx 2{,}449,$$

care este celula elementară a rețelei cubice cu fețe centrate, și, în al doilea rînd, romboedrul turtit, cu unghiul la vîrf

$$\alpha = \arccos(-1/3) \approx 109°28'$$

și cu raportul axial

$$c/a = \sqrt{3/8} \approx 0{,}6124,$$

care este celula elementară centrată în volum. Aceste rezultate se deduc imediat din forma tensorilor metrici corespunzători (v. anexa B).

Cunoscînd valoarea raportului axial care trebuie să revină rețelei cubice cu fețele centrate, considerată sub aspect hexagonal, este ușor de calculat raportul axial și pentru rețeaua corespunzătoare împachetării hexagonale celei mai compacte. Într-adevăr, în ambele cazuri avem de-a face cu aceleași straturi de împachetare compactă în planul bazei, însă perioada de identitate după direcția perpendiculară pe bază reprezintă trei astfel de straturi, în cazul rețelei cubice cu fețe centrate, și numai două, în cazul împachetării hexagonale celei mai compacte. De aici rezultă că raportul axial în cazul rețelei cu împachetarea hexagonală cea mai compactă este egal cu două treimi din raportul axial al rețelei cubice cu fețe centrate, adică

$$c/a = 2\sqrt{6}/3 \approx 1{,}633.$$

Pentru o informare mai amănunțită asupra cristalografiei și a diferitelor laturi ale simetriei cristalelor, se pot consulta următoarele cărți: Bhagavhantam și Venkataraiudu (1959); N. V. Belov (1947, 1951); Boki (1971); Boldîrev (1934); Varikaș și Haceatrean (1969); Vasiliev (1972); Veil (1968); Delone, Padurov, Aleksandrov (1934); Jdanov (1940); Zagalskaia și Litvinskaia (1973); Kopțik (1966); Kostov (1965); Lipson și Cocren (1956); Lonsdale (1952); Liubarski (1957); Popov și Șafranovski (1972); Fiodorov (1949); Flint (1956); Șaskolskaia ș.a. (1969 – 1972); Șafranovski (1968); Șubnikov (1940, 1951); Șubnikov, Flint și Boki (1940); Șubnikov și Kopțik (1972); Buerger (1948, 1956, 1970); Burkhardt (1947); International Tables (1952); Kleber (1969).

CAPITOLUL 2

SISTEME DE COORDONATE, VECTORI ȘI TENSORI

§ 16. SISTEME DE COORDONATE CARTEZIENE

Proprietatea deosebită a sistemelor de coordonate cristalografice — aceea de a exprima planurile și direcțiile cristalografice prin vectori de componente numere întregi — în numeroase domenii ale fizicii cristalelor nu este esențială, pe cînd faptul că componentele unui vector sau ale unui tensor care definesc un cîmp fizic (electric, magnetic, cîmpul tensiunilor mecanice) depind nu numai de intensitatea cîmpului, ci și de parametrii celulei elementare a cristalului, se resimte ca o serioasă dificultate. Din această cauză, în fizica cristalelor se preferă folosirea de coordonate *carteziene*, a căror proprietate remarcabilă constă în aceea că toți vectorii bazei lor au lungimea egală cu unitatea, fiind ortogonali între ei. Îi vom nota cu $\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$ și-i vom numi *versori,* iar pentru indici convenim să utilizăm litere latine, $i, j, k, l, m, n, \ldots = 1, 2, 3$, nu litere grecești. Produsul scalar al oricărui versor cu el însuși este egal cu unitatea, iar cu alt versor este egal cu zero, adică

$$\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{e}_k = \delta_{ik}, \qquad (16.1)$$

însă aceasta înseamnă că pentru un sistem de coordonate cartezian componentele covariante ale tensorului metric sînt definite prin simbolurile lui Kronecker

$$g_{ik} = \delta_{ik}. \qquad (16.2)$$

Evident, la fel sînt și componentele contravariante, g^{ik}, iar baza reciprocă coincide cu baza fundamentală

$$\boldsymbol{e}^1 = \boldsymbol{e}_1, \; \boldsymbol{e}^2 = \boldsymbol{e}_2, \; \boldsymbol{e}^3 = \boldsymbol{e}_3. \qquad (16.3)$$

Din moment ce vectorii bazei contravarianți nu se deosebesc de cei covarianți, este clar că nici componentele contravariante ale vectorilor nu se deosebesc de componentele lor covariante. Dar aceasta înseamnă atunci că se pot scrie toți indicii la același nivel — s-a adoptat să se scrie indicii jos, considerînd că orice indici care se repetă de două ori sînt indici de însumare. Componentele l_i

ale oricărui vector după axele sistemului de coordonate cristalografice, care sînt egale cu produsele scalare dintre acest vector și versorii axelor corespunzătoare,

$$l_i = \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{e}_i, \tag{16.4}$$

nu vor mai depinde deci de parametrii celulei elementare a cristalului: deoarece $\boldsymbol{e}_i$ este un vector unitar, fiecare dintre componentele l_i, este complet definită prin lungimea l a vectorului $\boldsymbol{l}$ și prin unghiul φ_i, pe care îl face acesta cu axa de coordonate corespunzătoare, X_i,

$$l_i = l \cos \varphi_i. \tag{16.5}$$

În sistemul de coordonate cartezian se simplifică foarte mult calculul produselor scalar și vectorial dintre vectori precum și al tuturor mărimilor legate de ele. Într-adevăr, în funcție de componentele sistemului cartezian, avem:
pentru produsul scalar al vectorilor $\boldsymbol{p}$ și $\boldsymbol{q}$

$$\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{q} = p_i q_i; \tag{16.6}$$

pentru lungimea vectorului $\boldsymbol{p}$

$$p = \sqrt{p_i p_i}; \tag{16.7}$$

pentru unghiul φ dintre vectorii $\boldsymbol{p}$ și $\boldsymbol{q}$

$$\varphi = \arccos \frac{p_i q_i}{\sqrt{p_j p_j q_k q_k}}. \tag{16.8}$$

Componentele produsului vectorial, $\boldsymbol{s} = \boldsymbol{p} \times \boldsymbol{q}$, se calculează după formula

$$s_i = \delta_{ijk} p_j q_k, \tag{16.9}$$

care poate fi scrisă și sub forma

$$\boldsymbol{s} = \delta_{ijk} p_j q_k \boldsymbol{e}_i. \tag{16.10}$$

De aici, se deduce imediat că produsul mixt a trei vectori este

$$\boldsymbol{r} \cdot (\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{q}) = \delta_{ijk} r_i p_j q_k. \tag{16.11}$$

Un sistem de coordonate carteziene, orientat într-un anumit fel, bine determinat față de sistemul cristalografic, se numește

sistem de coordonate cristalofizic; fixarea axelor sistemelor de coordonate cristalofizice este dată, pentru toate clasele de simetrie ale cristalelor, în anexa A.

Vom considera că fiecare dintre sistemele de coordonate care ne interesează este dat prin baza sa : sistemul cristalografic — prin vectorii bazei rețelei , $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$, iar cel cristalofizic — prin versorii $\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$. Relația dintre sistemul de coordonate cristalofizic și sistemul de coordonate cristalografic este complet definită prin coeficienții descompunerii vectorilor dintr-o bază după vectorii celeilalte baze : descompunerea vectorilor fundamentali ai unei rețele după versorii sistemului cristalofizic este dată de relația

$$\boldsymbol{a}_\alpha = A_{\alpha i}\, \boldsymbol{e}_i, \tag{16.12}$$

au, viceversa, descompunerea acestor versori după vectorii fundamentali ai rețelei va fi

$$\boldsymbol{e}_i = E_i^\alpha\, \boldsymbol{a}_\alpha. \tag{16.13}$$

Matricele formate din coeficienții dezvoltării, $\|A_{\alpha i}\|$ și $\|E_i^\alpha\|$ sînt inverse între ele

$$A_{\alpha i}\, E_i^\beta = \delta_\alpha^\beta, \quad E_i^\alpha\, A_{\alpha i} = \delta_{ij}. \tag{16.14}$$

Prin definiție (vezi § 11), componentele covariante ale tensorului metric sînt $g_{\alpha\beta} = \boldsymbol{a}_\alpha \cdot \boldsymbol{a}_\beta$. Înlocuind aici expresia (16.12) obținem

$$g_{\alpha\beta} = A_{\alpha i}\, A_{\beta i}. \tag{16.15}$$

Analog, vom găsi că

$$g^{\alpha\beta} = E_i^\alpha\, E_i^\beta. \tag{16.16}$$

Conform formulei (13.14), determinantul matricei de transformare de la o bază la alta este egal cu raportul dintre volumele celulelor construite pe vectorii bazei. Prin urmare,

$$\det \|A_{\alpha i}\| = v; \quad \det \|E_i^\alpha\| = 1/v, \tag{16.17}$$

v fiind volumul celulei elementare. Deoarece însă, după formula (16.15)

$$\det G = (\det \|A_{\alpha i}\|)^2,$$

rezultă că

$$\det G = v^2. \tag{16.18}$$

Trecerea de la sistemul de coordonate cristalografic la sistemul cristalofizic, ca și trecerea inversă, sînt cazuri particulare

ale trecerilor de la o bază vectorială la alta, tratate amănunțit în paragraful 13. Trebuie numai să se țină seama de faptul că sistemul de coordonate cristalografic, direcțiile și planurile sînt definite prin vectorii $\boldsymbol{l} = l^\alpha \boldsymbol{a}_\alpha$ și $\boldsymbol{n} = n_\alpha \boldsymbol{a}^\alpha$, ale căror lungimi sînt determinate din condiția ca componentele l^α și n_α să fie numere întregi și să nu aibă factori comuni. Dimpotrivă, în sistemele de coordonate cristalofizice, de regulă, toate direcțiile sînt date prin vectori de lungime egală cu unitatea, astfel încît l_i și n_i sînt componentele vectorilor unitari care definesc direcțiile respective. Obținem astfel următorul tabel

Mărimile care se compară	Trecerea de la sistemul cristalografic la sistemul cristalofizic	Trecerea de la sistemul cristalofizic la sistemul cristalografic
Vectorii bazei rețelei, $\boldsymbol{a}_\alpha$, și versorii, $\boldsymbol{e}_i$	$\boldsymbol{e}_i = E_i^\alpha \boldsymbol{a}_\alpha$	$\boldsymbol{a}_\alpha = A_{\alpha i} \boldsymbol{e}_i$
Vectorii bazei rețelei reciproce, $\boldsymbol{a}^\alpha$, și versorii, $\boldsymbol{e}_i$	$\boldsymbol{e}_i = A_{\alpha i} \boldsymbol{a}^\alpha$	$\boldsymbol{a}^\alpha = E_i^\alpha \boldsymbol{e}_i$
Indicii planurilor (fețelor), n_α, și componentele vectorului unitar, n_i	$n_i = \dfrac{E_i^\alpha n_\alpha}{\sqrt{g^{\beta\gamma} n_\beta n_\gamma}}$	$n_\alpha = \lambda A_{\alpha i} n_i$
Indicii direcțiilor (muchiilor), l^α, și componentele vectorului unitar, l_i	$l_i = \dfrac{A_{\alpha i} l^\alpha}{\sqrt{g_{\beta\gamma} l^\beta l^\gamma}}$	$l^\alpha = \lambda E_i^\alpha l_i$

Coeficienții λ sînt aleși astfel încît indicii să fie întregi și să nu aibă un factor comun.

Matricele $\|A_{\alpha i}\|$ și $\|E_i^\alpha\|$ pentru toate sistemele cristalografice sînt date în anexa B.

§ 17. TRANSFORMĂRI ORTOGONALE

Pentru rezolvarea unor probleme ale fizicii cristalelor deseori nu este convenabil sistemul cristalofizic, ci un alt sistem de coordonate cartezian oarecare, ale cărui direcții ale axelor sînt definite prin geometria problemei respective. Deoarece un sistem de coordonate cartezian este complet definit prin baza sa ortonormată, transformarea coordonatelor carteziene nu reprezintă altceva decît trecerea de la o bază ortonormată la alta. Astfel de transformări se numesc *transformări ortogonale*.

Fie sistemul de coordonate „vechi", X_1, X_2, X_3, construit pe baza $\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$, iar sistemul „nou" $X_{1'}$, $X_{2'}$, $X_{3'}$, pe baza $\boldsymbol{e}_{1'}$, $\boldsymbol{e}_{2'}$ $\boldsymbol{e}_{3'}$. Dezvoltarea bazei noi după vectorii celei vechi,

$$\boldsymbol{e}_{i'} = c_{i'k} \boldsymbol{e}_k, \tag{17.1}$$

este determinată de coeficienții $c_{i'k}$, care formează *matricea transformării ortogonale*

$$\|c_{i'k}\| = \begin{Vmatrix} c_{1'1} & c_{1'2} & c_{1'3} \\ c_{2'1} & c_{2'2} & c_{2'3} \\ c_{3'1} & c_{3'2} & c_{3'3} \end{Vmatrix}.$$

Ea se mai numește și *matricea cosinușilor*, deoarece fiecare element al ei reprezintă consinusul unghiului dintre axele de coordonate corespunzătoare (fig. 17.1)

$$c_{i'k} = \boldsymbol{e}_{i'} \cdot \boldsymbol{e}_k = \cos(X_{i'}, X_k) = \cos \alpha_{i'k}. \tag{17.2}$$

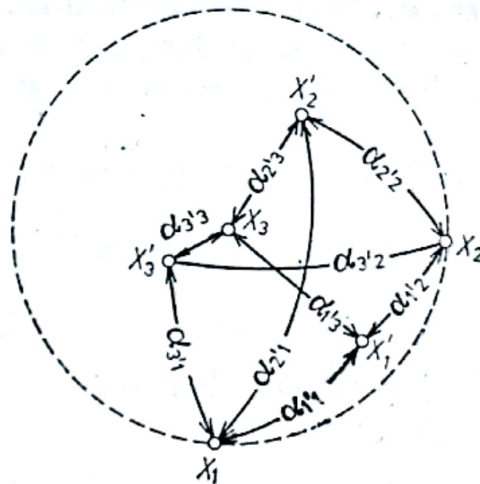


Fig. 17.1. Unghiurile α_{ik} dintre axele de coordonate ,,vechi'' și ,,noi''; proiecție stereografică

Transformarea inversă,

$$\boldsymbol{e}_k = c_{ki'}\, \boldsymbol{e}_{i'}, \tag{17.3}$$

este dată evident, prin matricea $\|c_{ki'}\|$, fiind totodată și inversa matricei inițiale, $\|c_{i'k}\|$, și transpusa ei. Astfel de matrice satisfac relațiile

$$c_{i'k}\, c_{j'k} = \delta_{i'j'}, \quad c_{i'k}\, c_{i'l} = \delta_{kl}, \tag{17.4}$$

și se numesc *matrice ortogonale*. Pătratul determinantului unei asemenea matrice este egal cu unitatea, sau

$$\Delta = \det \|c_{ik}\| = \pm 1. \tag{17.5}$$

Transformările ortogonale se subîmpart în *transformări proprii* (rotațiile) și *transformări improprii* (rotațiile cu inversie). Celor dintîi le corespund matrice cu determinantul +1, pe cînd celorlalte, cu determinantul −1.

Orice rotație R poate fi definită prin axa de rotație și un unghi de rotație în jurul ei. Prin urmare, pentru definirea oricărei rotații este suficient un vector $\boldsymbol{\varphi}$, a cărui direcție să coincidă cu axa de rotație, mărimea lui, φ, fiind egală cu unghiul de rotație. Vom conveni, de asemenea, că rotația $R(\boldsymbol{\varphi})$ în jurul vectorului $\boldsymbol{\varphi}$ se face în sensul șurubului drept. Vom ține seama de toate rotațiile posibile, dacă vom considera toți vectorii $\boldsymbol{\varphi}$ posibili, a căror lungime satisface inegalitatea $0 \leqslant \varphi \leqslant \pi$. În această situație, fiecărei rotații cu un unghi mai mic decît π, îi va corespunde un singur vector de acesta, iar pentru un unghi egal cu π — doi vectori egali ca mărime, dar de sensuri contrare. Rotația $R(\boldsymbol{\varphi})$ se notează cel mai des cu $R(\boldsymbol{k}, \varphi)$, unde $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{\varphi}/\varphi$ este vectorul unitar al direcției $\boldsymbol{\varphi}$.

Dacă noul sistem de coordonate cartezian, construit pe baza ortonormată, $\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_2', \boldsymbol{e}_3'$, se obține din sistemul vechi, construit pe baza $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$, prin aplicarea unei rotații $R(\boldsymbol{k}, \varphi)$, atunci matricea $\|r_{i'j}(\boldsymbol{k}, \varphi)\|$, corespunzătoare acestei rotații, adică matricea care definește dezvoltarea $\boldsymbol{e}_{i'} = r_{i'j}\, \boldsymbol{e}_j$ este următoarea *

$$\left\| \begin{matrix} \cos\varphi + k_1^2(1-\cos\varphi) & k_3\sin\varphi + k_1 k_2(1-\cos\varphi) & -k_2\sin\varphi + k_1 k_3(1-\cos\varphi) \\ -k_3\sin\varphi + k_2 k_1(1-\cos\varphi) & \cos\varphi + k_2^2(1-\cos\varphi) & k_1\sin\varphi + k_2 k_3(1-\cos\varphi) \\ k_2\sin\varphi + k_2 k_1(1-\cos\varphi) & -k_1\sin\varphi + k_3 k_2(1-\cos\varphi) & \cos\varphi + k_3^2(1-\cos)\varphi) \end{matrix} \right\|.$$

Folosind simbolurile lui Kronecker și Levi-Civita, elementele ei se scriu sub forma

$$r_{i'j}(\boldsymbol{k}, \varphi) = \delta_{i'j}\cos\varphi + \delta_{i'jl}\, k_l \sin\varphi + k_{i'}\, k_j\,(1 - \cos\varphi). \qquad (17.6)$$

În formula (17.6) $k_{i'}$, și k_j sînt componentele vectorului $\boldsymbol{k}$ în sistemele nou și, respectiv, vechi, însă deoarece un sistem se obține din celălalt printr-o rotație tocmai în jurul acestui vector, componentele vor coincide: $k_{1'} = k_1$, $k_{2'} = k_2$, $k_{3'} = k_3$.

Pentru unghiuri de rotație mici ($\varphi \ll 1$)

$$r_{i'j}(\boldsymbol{\varphi}) \approx \delta_{i'j} + \delta_{i'jk}\,\varphi_k. \qquad (17.7)$$

Rotația cu inversie cu unghiul φ în jurul unui vector unitar $\boldsymbol{k}$ reprezintă produsul dintre rotația respectivă propriu-zisă și transformarea de inversie

$$Q(\boldsymbol{k}, \varphi) = \bar{I} \cdot R(\boldsymbol{k}, \varphi).$$

---

* Pentru deducerea primei linii a acestei matrice este suficient să avem vectorul $\boldsymbol{e}_{1'}$ — rezultatul rotației vectorului $\boldsymbol{e}_1$ în jurul lui $\boldsymbol{k}$ cu unghiul φ — și să se calculeze produsele scalare $\boldsymbol{e}_{i'} \cdot \boldsymbol{e}_j$. Linia a doua și a treia se obțin imediat din prima linie prin permutări ciclice.

Prin urmare, matricea ei, $\|q_{i'j}(\boldsymbol{k}, \varphi)\|$, este produsul dintre matricea $\|r_{i'j}(\boldsymbol{k}, \varphi)\|$ și matricea inversiei, $\|-\delta_{i'j}\|$, adică

$$\|q_{i'j}(\boldsymbol{k}, \varphi)\| = \| - r_{i'j}(\boldsymbol{k}, \varphi)\|.$$

Rezultă deci că forma generală a matricei unei transformări ortogonale este

$$c_{i'j}(\boldsymbol{k}, \varphi) = \Delta[\delta_{i'j} \cos \varphi + \delta_{i'jl}\, k_l \sin \varphi + k_{i'} k_j(1 - \cos \varphi)], \quad (17.8)$$

unde $\Delta = \pm 1$, astfel că $\Delta = +1$ corespunde rotației proprii, iar $\Delta = -1$ rotației cu inversie.

În tabelul 17.1 sînt date matricele transformărilor cristalografice de simetrie atît în forma lor generală cît și în cazul în care axele de rotație sînt luate într-un mod special, cel mai des folosite în cristalografie și în fizica cristalelor.

Urma (de la cuvîntul englezesc *trace* — urmă; se folosește și notația Sp, de la cuvîntul din limba germană *Spur*), adică suma elementelor diagonale ale matricei $\|c_{i'j}(k, \varphi)\|$ se notează $\mathrm{tr}\|c_{i'j}\|$ fiind egală cu

$$c_{ij} = \Delta(1 + 2 \cos \varphi).$$

De aici

$$\cos \varphi = \frac{1}{2}(\Delta c_{jj} - 1). \quad (17.9)$$

Deoarece unghiul φ variază între limitele $(0, \pi)$ formula (17.9) permite determinarea lui complet univocă. Putem afla acum fără nici o dificultate și vectorul unitar al axei de rotație, $\boldsymbol{k}$

$$k_l = \frac{\Delta}{2 \sin \varphi} \delta_{li'j}\, c_{i'j}. \quad (17.10)$$

Această formulă este valabilă numai în cazul $\varphi \neq \pi$. Pentru $\varphi = \pi$, așa cum rezultă din tabelul 17.1, componentele k_l pot fi determinate folosind relațiile

$$k_1 = \pm \sqrt{\frac{\Delta c_{1'1} + 1}{2}}, \quad k_2 = \pm \sqrt{\frac{\Delta c_{2'2} + 1}{2}}, \quad k_3 = \pm \sqrt{\frac{\Delta c_{3'3} + 1}{2}} \quad (17.11)$$

semnele trebuind să fie luate astfel încît

$$k_{i'} k_j = \frac{1}{2} \Delta c_{i'j}. \quad (17.12)$$

Tabelul 17.1

Matricele transformărilor de simetrie cristalografice și a celor limită, în cazul alegerii arbitrare și în cazul alegerii speciale a vectorului unitar al axei de rotație, $\boldsymbol{k}$

	1	$\bar{1}$
	$\begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix}$
	2	*m*
	$\begin{Vmatrix} 2k_1^2-1 & 2k_1k_2 & 2k_3k_1 \\ 2k_1k_2 & 2k_2^2-1 & 2k_2k_3 \\ 2k_3k_1 & 2k_2k_3 & 2k_3^2-1 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} 1-2k_1^2 & -2k_1k_2 & -2k_3k_1 \\ -2k_1k_2 & 1-2k_2^2 & -2k_2k_3 \\ -2k_3k_1 & -2k_2k_3 & 1-2k_3^2 \end{Vmatrix}$
$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{e}_1$	$\begin{Vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix}$
$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{e}_1$	$\begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}$
$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{e}_2$	$\begin{Vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}$
$\boldsymbol{k} = \dfrac{\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2}{\sqrt{2}}$	$\begin{Vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}$
$\boldsymbol{k} = \dfrac{\boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2}{\sqrt{2}}$	$\begin{Vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}$
$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{e}_1 \cos\psi + \boldsymbol{e}_2 \sin\psi$	$\begin{Vmatrix} \cos 2\psi & \sin 2\psi & 0 \\ \sin 2\psi & -\cos 2\psi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} -\cos 2\psi & -\sin 2\psi & 0 \\ -\sin 2\psi & \cos 2\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}$
	4	$\bar{4}$
	$\begin{Vmatrix} k_1^2 & k_1k_2 + k_3 & k_3k_1 - k_2 \\ k_1k_2 - k_3 & k_2^2 & k_2k_3 + k_1 \\ k_3k_1 + k_2 & k_2k_3 - k_1 & k_3^2 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} -k_1^2 & -k_3 - k_1k_2 & k_2 - k_3k_1 \\ k_3 - k_1k_2 & -k_2^2 & -k_1 - k_2k_3 \\ -k_2 - k_3k_1 & k_1 - k_2k_3 & -k_3^2 \end{Vmatrix}$
$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{e}_3$	$\begin{Vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix}$

Tabelul 17.1 (continuare)

	3	$\bar{3}$
	$\begin{Vmatrix} \frac{3k_1^2-1}{2} & \frac{3k_1k_2+k_3\sqrt{3}}{2} & \frac{3k_3k_1-k_3\sqrt{3}}{2} \\ \frac{3k_1k_2-k_3\sqrt{3}}{2} & \frac{3k_2^2-1}{2} & \frac{3k_2k_3+k_1\sqrt{3}}{2} \\ \frac{3k_3k_1+k_2\sqrt{3}}{2} & \frac{3k_2k_3-k_1\sqrt{3}}{2} & \frac{3k_3^2-1}{2} \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} \frac{1-3k_1^2}{2} & \frac{-k_3\sqrt{3}-3k_1k_2}{2} & \frac{k_2\sqrt{3}-3k_3k_1}{2} \\ \frac{k_2\sqrt{3}-3k_1k_2}{2} & \frac{1-3k_2^2}{2} & \frac{-k_1\sqrt{3}-3k_2k_3}{2} \\ \frac{-k_2\sqrt{3}-3k_3k_1}{2} & \frac{k_1\sqrt{3}-3k_2k_3}{2} & \frac{1-3k_3^2}{2} \end{Vmatrix}$
$k = e_3$	$\begin{Vmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}$
$k = \frac{e_1+e_2+e_3}{\sqrt{3}}$	$\begin{Vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{Vmatrix}$
$k = \frac{-e_1+e_2+e_3}{\sqrt{3}}$	$\begin{Vmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{Vmatrix}$

	6	$\bar{6}$
	$\begin{Vmatrix} \frac{1+k_1^2}{2} & \frac{k_1k_2+k_3\sqrt{3}}{2} & \frac{k_3k_1-k_2\sqrt{3}}{2} \\ \frac{k_1k_2-k_3\sqrt{3}}{2} & \frac{1+k_2^2}{2} & \frac{k_2k_3+k_1\sqrt{3}}{2} \\ \frac{k_3k_1+k_2\sqrt{3}}{2} & \frac{k_2k_3-k_1\sqrt{3}}{2} & \frac{1+k_3^2}{2} \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} \frac{-1-k_1^2}{2} & \frac{-k_3\sqrt{3}-k_1k_2}{2} & \frac{k_2\sqrt{3}-k_3k_1}{2} \\ \frac{k_3\sqrt{3}-k_1k_2}{2} & \frac{-1-k_2^2}{2} & \frac{-k_1\sqrt{3}-k_2k_3}{2} \\ \frac{-k_2\sqrt{3}-k_3k_1}{2} & \frac{k_1\sqrt{3}-k_2k_3}{2} & \frac{-1-k_3^2}{2} \end{Vmatrix}$
$k = e_3$	$\begin{Vmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix}$

$R(e_3, \varphi)$	$\bar{1}\, R(e_3, \varphi)$
$\begin{Vmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}$	$\begin{Vmatrix} -\cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & -\cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix}$

Astfel, cunoscînd axa și mărimea rotației, se pot calcula elementele matricei $\|c_{i'j}\|$, și viceversa, cunoscînd elementele matricei, se pot determina cu ajutorul relațiilor (17.9)—(17.12) axa de rotație și unghiul de rotație.

Rezultatul efectuării a două transformări ortogonale consecutive — trecerea de la baza veche, e_1, e_2, e_3, la una nouă, $e_{1'}$, $e_{2'}, e_{3'}$, și după aceasta, de la baza nouă, la una „și mai nouă”, $e_{1''}$, $e_{2''}$, $e_{3''}$ — se poate scrie sub forma

$$e_{i''} = c_{i''k}\, e_k,$$

astfel încît $C = \|c_{i''k}\|$, care realizează trecerea directă de la baza veche la cea și mai nouă, se exprimă prin matricea fiecărei treceri

$$C^{(1)} = \|c_{j'k}\|$$

și

$$c^{(2)} = \| c_{i''j'} \|,$$

prin relația

$$c_{i''k} = c_{i''j'}\, c_{j'k}. \tag{17.13}$$

Această formulă poate fi scrisă sub formă de egalitate matriceală, $C = C^{(2)}C^{(1)}$; în acest caz este necesar să se țină seama de ordinea factorilor: matricea care corespunde transformării efectuate mai înainte se scrie mai la dreapta.

Efectuarea succesivă a unor operații se aplică, în particular, la scrierea trecerii de la un sistem de coordonate, la altul, prin intermediul unghiurilor Euler. Rotația care duce sistemul de coordonate $OX_1X_2X_3$ în sistemul $OX_1'X_2'X_3'$ se poate realiza prin următorul șir de operații succesive.

1. Îndreptăm axa ajutătoare Y_1 după dreapta de intersecție a planurilor OX_1X_2 și $OX_1'X_2'$. Alegem sensul pozitiv pe axa Y_1 astfel ca unghiul $\varphi = \angle X_1OY_1$, măsurat în sensul de la X_1 la X_2, să fie cuprins între limitele $0 \leqslant \varphi < \pi$. Rotația sistemului de coordonate $OX_1X_2X_3$ în jurul axei X_3 cu unghiul φ îl transpune în sistemul $OY_1Y_2X_3$. Matricea acestei rotații este

$$R^{(\varphi)} = \begin{Vmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}.$$

2. Rotația în jurul axei Y_1 cu unghiul $\theta = \angle X_3OX_3'$ (acesta se măsoară dinspre X_3 spre Y_2) transpune sistemul $OY_1Y_2X_3$ în sistemul $OY_1Y_2'X_3'$. Matricea acestei rotații este

$$R^{(\theta)} = \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{Vmatrix}.$$

3. În sfîrșit, rotația în jurul axei X_3' cu unghiul ψ, măsurat de la Y_1 la Y_2', transpune sistemul $OY_1Y_2'X_3'$ în sistemul $OX_1'X_2'X_3'$. Matricea lui este

$$R^{(\psi)} = \begin{Vmatrix} \cos\psi & \sin\psi & 0 \\ -\sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}.$$

Evident, aceste trei rotații pot fi înlocuite printr-o singură rotație (fig. 17.2), care transpune sistemul $OX_1X_2X_3$ în sistemul $OX_1'X_2'X_3'$. Matricea acestei rotații este

$$R = R^{(\psi)}\, R^{(\theta)}\, R^{(\varphi)}.$$

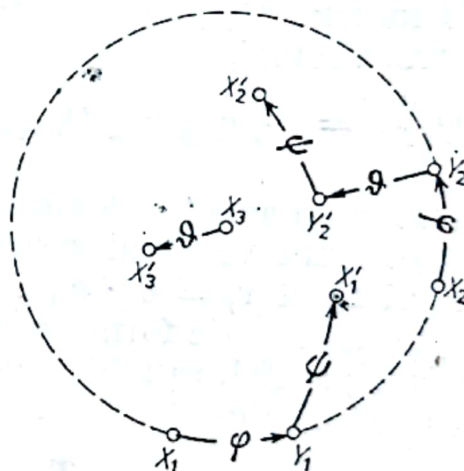


Fig. 17.2. Unghiurile Euler, proiecție stereografică: $\varphi = 30°$, $\theta = 40°$, $\psi = 50°$.

Înmulțind matricele în ordinea indicată, obținem

$$R = \begin{Vmatrix} \cos\varphi\cos\psi - \sin\varphi\cos\theta\sin\psi & \sin\varphi\cos\psi + \cos\varphi\cos\theta\sin\psi & -\sin\theta\sin\psi \\ -\cos\varphi\sin\psi - \sin\varphi\cos\theta\cos\psi & -\sin\varphi\sin\psi + \cos\varphi\cos\theta\cos\psi & -\sin\theta\cos\psi \\ -\sin\varphi\sin\theta & \cos\varphi\sin\theta & \cos\theta \end{Vmatrix} \tag{17.14}$$

Mai sus au fost examinate trei mijloace de calculare a matricei unei transformări ortogonale de coordonate cele mai utilizate. Dacă sînt cunoscute unghiurile dintre axele noi și cele vechi, se utilizează formula (17.2); dacă este cunoscută transformarea care transpune sistemul vechi în cel nou, se utilizează formula (17.8); în fine, dacă sînt date unghiurile Euler, se folosește formula (17.14).

§ 18. TENSORII DE RANGUL DOI

După cum se știe, în cazul trecerii de la o bază $\boldsymbol{e}_k$ la o bază $\boldsymbol{e}_{i'} = c_{i'k}\boldsymbol{e}_k$, componentele v_k ale unui vector $\boldsymbol{v}$, se transformă după legea

$$v_{i'} = c_{i'k}\, v_k, \qquad v_k = c_{i'k}\, v_{i'}. \tag{18.1}$$

Cele nouă mărimi T_{kl}, care se transformă ca produsele componentelor a doi vectori, adică după legea

$$T_{i'j'} = c_{i'k}\, c_{j'l}\, T_{kl}, \quad T_{kl} = c_{i'k}\, c_{j'l}\, T_{i'j'}, \tag{18.2}$$

se numesc *componentele tensorului de rangul doi*, **T**. Analog, cele $3^3 = 27$ mărimi Q_{lmn}, care se transformă ca produsele componentelor a trei vectori,

$$Q_{i'j'k'} = c_{i'l}\, c_{j'm}\, c_{k'n}\, Q_{lmn},\ Q_{lmn} = c_{i'l}\, c_{j'm}\, c_{k'n}\, Q_{i'j'k'} \tag{18.3}$$

se numesc *componentele tensorului de rangul trei*, **Q**, ș.a.m.d.

După cum vectorul $\boldsymbol{v}$ se scrie sub forma $\boldsymbol{v} = v_i \cdot \boldsymbol{e}_i$, componentele lui fiind $v_i = \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{e}_i$, tensorul **T** poate fi reprezentat sub forma (un tensor de forma $\boldsymbol{e}_k\, \boldsymbol{e}_l$ — în cazul general $\boldsymbol{ab}$ — se numește *diadă*; astfel, în relația (18.4) tensorul **T** este reprezentat ca suma a nouă diade)

$$\mathbf{T} = \boldsymbol{e}_k\, T_{kl}\, \boldsymbol{e}_l \tag{18.4}$$

(sau $T_{kl}\, \boldsymbol{e}_k\, \boldsymbol{e}_l$). În acest caz, componentele lui, T_{kl}, în baza $\boldsymbol{e}_k$ se calculează după formula

$$T_{kl} = \boldsymbol{e}_k \cdot \mathbf{T} \cdot \boldsymbol{e}_l. \tag{18.5}$$

Componentele $T_{i'j'}$ ale aceluiași tensor în baza $\boldsymbol{e}_{i'} = c_{i'k}\, \boldsymbol{e}_k$ sînt egale cu

$$T_{i'j'} = \boldsymbol{e}_{i'} \cdot T \cdot \boldsymbol{e}_{j'}.$$

Înlocuind aici expresia (18.4) și observînd că

$$\boldsymbol{e}_{i'} \cdot \boldsymbol{e}_k = c_{i'k},$$

ajungem la formula (18.2). Aceasta arată că legea de transformare (18.2) a componentelor tensoriale T_{kl} este formulată astfel încît tensorul definit prin aceste componente, $\boldsymbol{e}_k T_{kl} \boldsymbol{e}_l$, să fie, ca și vectorul, o entitate geometrică, adică să nu depindă de sistemul de coordonate în care este definit.

Tensorul de rangul doi joacă rolul de operator liniar, care transpune o mulțime $\boldsymbol{u}$ într-o altă mulțime a lor, $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}(\boldsymbol{u})$, astfel încît

$$\boldsymbol{v}(\lambda \boldsymbol{u}^{(1)} + \mu \boldsymbol{u}^{(2)}) = \lambda\, \boldsymbol{v}(\boldsymbol{u}^{(1)}) + \mu \boldsymbol{v}(\boldsymbol{u}^{(2)}), \qquad (18.6)$$

unde $\boldsymbol{u}^{(1)}$ și $\boldsymbol{u}^{(2)}$ sînt orice vectori din mulțimea $\boldsymbol{u}$, iar λ și μ sînt numere reale arbitrare. Din relația (18.6) rezultă că în orice bază ortogonală $\boldsymbol{e}_k$ componentele $\boldsymbol{v}_k$ ale vectorilor $\boldsymbol{v}$ sînt funcții liniare ale componentelor u_l, ale vectorilor $\boldsymbol{u}$ corespunzători

$$v_k = T_{kl}\, u_l. \qquad (18.7)$$

În baza $\boldsymbol{e}_{i'} = c_{i'k} \boldsymbol{e}_k$ această dependență capătă forma

$$v_{i'} = T_{i'j'}\, u_{j'},$$

iar din faptul că componentele vectoriale u_l și v_k se transformă după legea (18.1), rezultă că coeficienții T_{kl} se transformă după formulele (18.2), adică sînt într-adevăr componente ale tensorului de rangul doi, $\mathbf{T}$. De aici rezultă că relația (18.7) poate fi scrisă într-o formă independentă de coordonate

$$\boldsymbol{v} = \mathbf{T} \cdot \boldsymbol{u}. \qquad (18.8)$$

Să examinăm unele cazuri speciale de transformări liniare ale mulțimilor vectoriale. Dacă vectorii $\boldsymbol{v}$ sînt pur și simplu egali cu vectorii $\boldsymbol{u}$, tensorul corespunzător se numește *tensor unitar* și se notează cu $\mathbf{I}$. Componentele tensorului unitar vor fi, în orice sistem de coordonate,

$$I_{kl} = \delta_{kl}.$$

Dacă vectorii $\boldsymbol{v}$ sînt coliniari cu vectorii $\boldsymbol{u}$ fiind de λ ori mai mari, dependența liniară a vectorilor $\boldsymbol{v}$ față de $\boldsymbol{u}$ se realizează de către tensorul $\lambda\, \mathbf{I}$ (tensorii de o seamenea formă se numesc *tensori sferici*). Scrierii $\boldsymbol{v} = \lambda\, \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{u}$ îi este echivalentă scrierea mai simplă $v = \lambda \boldsymbol{u}$.

O componentă a oricărui vector $\boldsymbol{u}$, paralelă cu un vector unitar dat, $\boldsymbol{k}$, poate fi scrisă sub forma $\boldsymbol{kk} \cdot \boldsymbol{u}$. Astfel, tensorul $\boldsymbol{kk}$ realizează proiecția vectorilor pe dreapta paralelă cu vectorul unitar $\boldsymbol{k}$. Analog, proiecția vectorilor pe un plan perpendicular pe un vector unitar $\boldsymbol{k}$ se realizează prin intermediul tensorului $\mathbf{I} - \boldsymbol{kk}$.

Rotaţia vectorilor în jurul axei $\boldsymbol{k}$ cu unghiul φ se realizează cu ajutorul tensorului

$$\mathbf{R}(\boldsymbol{k}, \varphi) = \mathbf{I} \cos\varphi - \mathbf{I} \times \boldsymbol{k} \sin\varphi + \boldsymbol{k}\boldsymbol{k}(1 - \cos\varphi),$$
$$R_{ij} = \delta_{ij}\cos\varphi + \delta_{ijl}k_l \sin\varphi + k_i k_j (1 - \cos\varphi). \tag{18.9}$$

Aceasta rezultă din formula (17.6) (produsul vectorial al unui tensor $\mathbf{T}$ cu un vector $\boldsymbol{v}$ se defineşte analog produsului scalar: dacă $\mathbf{T} = \boldsymbol{e}_k T_{kl} \boldsymbol{e}_l$, atunci $\mathbf{T} \times \boldsymbol{v} = \boldsymbol{e}_k T_{kl}(\boldsymbol{e}_l \times \boldsymbol{v})$).

Dacă determinantul tensorului $\mathbf{T}$ este diferit de zero, dependenţa liniară $\boldsymbol{v} = \mathbf{T} \cdot \boldsymbol{u}$ poate fi transformată

$$\boldsymbol{u} = \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{v}, \quad u_j = P_{jk} v_k.$$

Tensorul $\mathbf{P}$, avînd componentele

$$P_{jk} = \frac{\tau_{kj}}{\det \mathbf{T}}, \tag{18.10}$$

în care τ_{kj}, suplimentul algebric al elementului T_{kj} din determinantul $\det \|T_{il}\|$, se numeşte *inversul* tensorului $\mathbf{T}$; acesta se notează $\mathbf{P} = \mathbf{T}^{-1}$. Tensorii inverşi (unul altuia) satisfac identităţile

$$T_{ij} P_{jk} = \delta_{ik}, \quad P_{jk} T_{kl} = \delta_{jl}. \tag{18.11}$$

Tensorii care proiectează vectorii pe o dreaptă sau pe un plan nu au tensori inverşi, pe cînd tensorul $\mathbf{R}(\boldsymbol{k}, \varphi)$, care roteşte vectorii, are tensor invers.

Ca şi matricea, un tensor de rangul doi poate fi transpus. Dacă un tensor nu se schimbă prin transpunerea ($\mathbf{T}^* = \mathbf{T}$), atunci el se numeşte *tensor simetric*, iar dacă prin aceasta îşi schimbă semnul ($\mathbf{T}^* = -\mathbf{T}$), se numeşte *tensor antisimetric*. Orice tensor $\mathbf{T}$ se descompune într-o *parte simetrică*,

$$\mathbf{S} = 1/2\,(\mathbf{T} + \mathbf{T}^*),$$

şi o *parte antisimetrică*

$$\mathbf{A} = 1/2\,(\mathbf{T} - \mathbf{T}^*);$$

suma lor este egală cu tensorul iniţial, $\mathbf{T}$.

Un tensor simetric, S_{ij}, se descompune, la rîndul său, într-o *partea sferică*, $1/3\, S_{kk}\, \delta_{ij}$, şi un *deviator*,

$$D_{ij} = S_{ij} - 1/3\, S_{kk}\, \delta_{ij}.$$

Urma părţii sferice este egală cu urma tensorului, iar urma deviatorului, cu zero; în general, orice tensor simetric de rangul doi, a cărui urmă este egală cu zero, se numeşte *deviator*.

Tensorii de rangul doi pot fi consideraţi şi ca rezultat al diferenţierii unui vector în raport cu un vector sau ca o diferenţiere dublă a unei funcţii scalare în raport cu un vector. Să examinăm, mai întîi, operaţia mai simplă — diferenţierea unei funcţii scalare în raport cu un vector. Dacă f este o funcţie scalară de componente ale vectorului $\boldsymbol{u}$ (şi, eventual de alţi parametri), mărimile

$$v_k = \frac{\partial f}{\partial u_k} \tag{18.12}$$

se transformă ca nişte componente ale unui vector. Acest fapt permite ca (18.12) să fie scris sub forma

$$\boldsymbol{v} = \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{u}},$$

cu care se subliniază independenţa acestei operaţii de alegerea sistemului de coordonate.

Analog se defineşte derivarea unui vector în raport cu un vector. Dacă componentele unui vector $\boldsymbol{v}$ sînt funcţii de componentele unui vector $\boldsymbol{u}$, cele nouă mărimi

$$T_{kl} = \frac{\partial v_k}{\partial u_l} \tag{18.13}$$

se transformă ca componentele unui tensor de rangul doi. Prin urmare, (18.13) poate fi scrisă sub forma

$$\mathbf{T} = \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \boldsymbol{u}}.$$

Tot tensor de rangul doi este şi derivata a doua a unei funcţii f în raport cu argumentele vectoriale ale ei, $\boldsymbol{u}$ şi $\boldsymbol{v}$

$$\mathbf{T} = \frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{u} \partial \boldsymbol{v}}, \quad T_{kl} = \frac{\partial^2 f}{\partial u_k \, \partial v_l}.$$

Dacă însă această derivată de ordinul doi se face după unul şi acelaşi argument, adică $\mathbf{T} = \partial^2 f/(\partial \boldsymbol{u} \partial \boldsymbol{u})$, atunci tensorul $\mathbf{T}$ este simetric.

§ 19. VECTORII PROPRII ȘI VALORILE PROPRII ALE UNUI TENSOR SIMETRIC DE RANGUL DOI

Un tensor de rangul doi, **S**, care înmulțește scalar un vector $\boldsymbol{u}$, îl transformă în vectorul $\boldsymbol{v} = \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{u}$. Acei vectori care la această operație nu își modifică direcția, schimbîndu-și numai lungimea (se lungesc sau se scurtează), se numesc *vectorii proprii* ai tensorului **S** (fig. 19.1). Ei satisfac, prin urmare, ecuația

$$\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{u} = S\boldsymbol{u}, \quad S_{ik}\, u_k = S u_i, \tag{19.1}$$

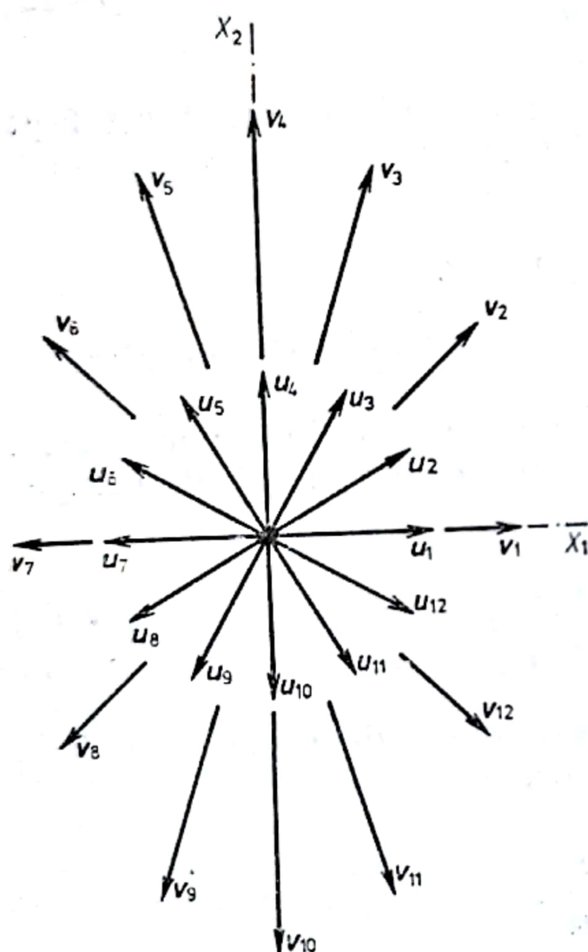


Fig. 19.1. Acțiunea tensorului simetric $S = 3/2\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_1 + 5/2\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{e}_2$ asupra vectorilor $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_{12}$; $v_i = \mathbf{S}.\boldsymbol{u}_i \cdot \boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_4, \boldsymbol{u}_7$ și $\boldsymbol{u}_{10}$ sînt vectorii proprii ai tensorului **S**.

în care S este un număr care arată de cîte ori se mărește vectorul $\boldsymbol{u}$ sub acțiunea tensorului **S** și se numește *valoarea proprie* a tensorului **S**, care corespunde vectorului propriu dat.

Dacă un anumit vector $\boldsymbol{u}$ satisface această ecuație, atunci ea va fi satisfăcută și de orice vector coliniar cu el. Rezultă, prin urmare, că se poate vorbi despre direcții proprii ale tensorului; direcția este dată, firește, printr-un vector unitar. Vom impune deci vectorului $\boldsymbol{u}$ condiția suplimentară

$$\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u} = u_i\, u_i = 1. \tag{19.2}$$

Transcriind ecuaţia (19.1) sub forma

$$(\mathbf{S} - S\mathbf{I}) \cdot \boldsymbol{u} = 0,$$
$$(S_{ik} - S\delta_{ik})\, u_k = 0, \tag{19.3}$$

vedem că acestea constituie trei ecuaţii liniare omogene în componentele vectorului $\boldsymbol{u}$. Ele sînt verificate, fireşte, de soluţia banală, $\boldsymbol{u} = 0$; aceasta nu defineşte, totuşi, nici o direcţie. După cum se ştie, pot exista alte soluţii ale sistemului liniar omogen care să nu fie banale, numai dacă determinantul sistemului este nul

$$\det(\mathbf{S} - S\mathbf{I}) = \begin{vmatrix} S_{11} - S & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} - S & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} - S \end{vmatrix} = 0. \tag{19.4}$$

Deoarece tensorul $\mathbf{S}$ este dat, condiţia (19.4) reprezintă de fapt ecuaţia pe care trebuie să o satisfacă valoarea proprie S. Ecuaţia (19.4) se numeşte *ecuaţia caracteristică a tensorului*. Întrucît componentele unui tensor sînt mărimi reale, această ecuaţie de gradul trei are, fie o rădăcină reală şi două rădăcini imaginare complex-conjugate, fie trei rădăcini reale, iar în cazul în care tensorul este simetric, se realizează numai a doua posibilitate. Într-adevăr, o rădăcină reală, cum este $S_{(3)}$, oricum există. Să presupunem că am aflat-o. Atunci, din sistemul de ecuaţii liniare

$$(S_{ik} - S_{(3)}\delta_{ik})u_k^{(3)} = 0,$$

putem găsi şi vectorul unitar $\boldsymbol{u}^{(3)}$, care corespunde valorii proprii, $S_{(3)}$. Să introducem un sistem de coordonate carteziene, $X_{1'}X_{2'}X_{3'}$, avîndu-l drept versor $\boldsymbol{e}_{3'}$ pe $\boldsymbol{u}^{(3)}$. Este uşor de verificat că în acest sistem tensorul $\mathbf{S}$ are forma

$$\|S_{j'l'}\| = \begin{Vmatrix} S_{1'1'} & S_{1'2'} & 0 \\ S_{1'2'} & S_{2'2'} & 0 \\ 0 & 0 & S_{(3)} \end{Vmatrix} \tag{19.5}$$

(pentru aceasta se face uz mai ales de simetria lui). Prin urmare, ecuaţia (19.4) poate fi scrisă în felul următor

$$\begin{vmatrix} S_{1'1'} - S & S_{1'2'} & 0 \\ S_{1'2'} & S_{2'2'} - S & 0 \\ 0 & 0 & S_{(3)} - S \end{vmatrix} = 0.$$

Calculînd acest determinant găsim alte două valori proprii

$$S_{(1,2)} = \frac{1}{2} \left[(S_{1'1'} + S_{2'2'}) \pm \sqrt{(S_{1'1'} - S_{2'2'})^2 + (2S_{1'2'})^2} \right]. \qquad (19.6)$$

Deoarece expresia de sub radical, fiind suma a două pătrate, este pozitivă şi aceste două rădăcini vor fi reale, ceea ce trebuie demonstrat.

Vectorii proprii care corespund diferitelor valori proprii sînt ortogonali între ei. Într-adevăr, înmulţind scalar ecuaţiile pentru vectorii proprii

$$\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{u}^{(1)} = S_{(1)} \boldsymbol{u}^{(1)}, \ \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{u}^{(2)} = S_{(2)} \boldsymbol{u}^{2}$$

cu $\boldsymbol{u}^{(2)}$ şi, respectiv, cu $\boldsymbol{u}^{(1)}$ şi scăzînd una din cealaltă, obţinem

$$\boldsymbol{u}^{(2)} \cdot \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{u}^{(1)} - \boldsymbol{u}^{(1)} \cdot \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{u}^{(2)} = (S_{(1)} - S_{(2)})\, \boldsymbol{u}^{(1)} \cdot \boldsymbol{u}^{(2)}.$$

Partea stîngă a acestei egalităţi este egală cu zero, ca urmare a simetricităţii tensorului $\mathbf{S}$, deci din faptul că valorile proprii sînt diferite ($S_{(1)} - S_{(2)} \neq 0$) rezultă direct ortogonalitatea vectorilor $\boldsymbol{u}^{(1)}$ şi $\boldsymbol{u}^{(2)}$.

Dacă toate valorile proprii ale tensorului $\mathbf{S}$ sînt diferite, vectorii săi proprii, $\boldsymbol{u}^{(k)}$, sînt ortogonali, putînd fi astfel utilizaţi drept bază ortonormată. În această bază tensorul capătă o formă deosebit de simplă

$$\mathbf{S} = S_{(1)} \boldsymbol{u}^{(1)} \boldsymbol{u}^{(1)} + S_{(2)} \boldsymbol{u}^{(2)} \boldsymbol{u}^{(2)} + S_3 \boldsymbol{u}^{(3)} \boldsymbol{u}^{(3)}, \qquad (19.7)$$

iar matricea lui, formă diagonală

$$\| S_{ij} \| = \begin{Vmatrix} S_{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & S_{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & S_{(3)} \end{Vmatrix}. \qquad (19.8)$$

Cînd două valori proprii coincid (să zicem $S_{(1)} = S_{(2)} \neq S_{(3)}$), lor le corespunde un întreg plan de vectori proprii, perpendicular pe vectorul propriu $\boldsymbol{u}^{(3)}$. Într-adevăr, din (19.6) rezultă că în orice sistem de coordonate cartezian, pentru care drept versor $\boldsymbol{e}_3$ este luat vectorul propriu $\boldsymbol{u}^{(3)}$, tensorul $\mathbf{S}$ capătă forma

$$\begin{Vmatrix} S_{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & S_{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & S_{(3)} \end{Vmatrix}, \qquad (19.9)$$

ceea ce şi arată că într-adevăr orice vector perpendicular pe $\boldsymbol{u}^{(3)}$ este un vector propriu al tensorului **S**, corespunzînd valorii proprii $S_{(1)}$. Astfel de tensori este convenabil să fie scrişi sub forma

$$\mathbf{S} = S_{\perp}\mathbf{I} + (S_{\parallel} - S_{\perp})\boldsymbol{kk}, \quad S_{ij} = S_{\perp}\delta_{ij} + (S_{\parallel} - S_{\perp})k_i k_j, \tag{19.10}$$

în care $\boldsymbol{k}$ este vectorul propriu unic (izolat), $S_{\parallel}$ este valoarea proprie corespunzătoare lui, iar $S_{\perp}$ valoarea proprie corespunzătoare planului vectorilor proprii.

În sfîrşit, cînd toate trei valorile proprii coincid ($S_{(1)} = S_{(2)} = S_{(3)}$), tensorul este egal cu

$$\mathbf{S} = S\mathbf{I}, \quad S_{ij} = S\delta_{ij}; \tag{19.11}$$

pentru acest tensor, orice vector este un vector propriu.

Să examinăm pe cîteva exemple simple cum se determină practic valorile proprii şi vectorii proprii ai unui tensor simetric de rangul doi.

Exemplul 1. În baza $\boldsymbol{e}_k$ tensorul S_{ij} este de forma

$$\| S_{ij} \| = \begin{Vmatrix} 11 & \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 7 \end{Vmatrix}.$$

Vom calcula valorile lui proprii, rezolvînd în acest scop ecuaţia

$$\begin{vmatrix} 11 - S & \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & 9 - S & 0 \\ 0 & 0 & 7 - S \end{vmatrix} = 0$$

adică

$$(S^2 - 20S + 96)(7 - S) = 0.$$

De aici

$$S_{(1)} = 12, \quad S_{(2)} = 8, \quad S_{(3)} = 7.$$

Determinăm vectorul propriu $\boldsymbol{u}^{(1)}$, care corespunde valorii proprii $S_{(1)} = 12$, din sistemul de ecuaţii liniare

$$\begin{aligned} -u_1^{(1)} + \sqrt{3}\,u_2^{(1)} &= 0, \\ \sqrt{3}\,u_1^{(1)} - 3u_2 &= 0, \\ -5u_3^{(1)} &= 0. \end{aligned}$$

Aici numai două ecuaţii sînt independente, deoarece ecuaţia a doua este egală cu prima înmulţită cu -3. Din acest sistem găsim deci, că

$$u_3^{(1)} = 0, \qquad u_1^{(1)} = \sqrt{3}\, u_2^{(1)}.$$

Rezultă că primul vector propriu este în fond determinat de

$$\boldsymbol{u}^{(1)} = (\sqrt{3}\, \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2) u_2^{(1)}.$$

Impunînd condiţia ca

$$\boldsymbol{u}^{(1)} \cdot u^{(1)} = 1,$$

obţinem $u_2^{(1)} = \pm 1/2$, iar în final avem

$$\boldsymbol{u}^{(1)} = \pm \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\, \boldsymbol{e}_1 + \frac{1}{2}\, \boldsymbol{e}_2 \right).$$

Vectorul propriu $\boldsymbol{u}^{(2)}$ este găsit din sistemul de ecuaţii

$$\begin{aligned} 3u_1^{(2)} + \sqrt{3}\, u_2^{(2)} \qquad &= 0,\\ \sqrt{3}\, u_1^{(2)} + u_2^{(2)} \qquad &= 0,\\ - u_3^{(2)} &= 0. \end{aligned}$$

El este egal cu

$$\boldsymbol{u}^{(2)} = \pm \left(\frac{1}{2}\, \boldsymbol{e}_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}\, \boldsymbol{e}_2 \right).$$

În fine, pentru vectorul propriu $\boldsymbol{u}^{(3)}$, obţinem sistemul de ecuaţii

$$\begin{aligned} 4\, u_1^{(3)} + \sqrt{3}\, u_2^{(3)} \qquad &= 0,\\ \sqrt{3}\, u_1^{(3)} + 2\, u_2^{(3)} \qquad &= 0,\\ 0\, u_3^{(2)} &= 0. \end{aligned}$$

Primele două ecuaţii formează un sistem de două ecuaţii liniare omogene cu două necunoscute. Determinantul său este egal cu 5. De aceea, el are numai soluţia banală, $u_1^{(3)} = u_2^{(3)} = 0$. Componenta $u_3^{(3)}$ poate avea orice valoare, însă din condiţia $\boldsymbol{u}^{(3)} \cdot \boldsymbol{u}^{(3)} = 1$, rezultă că $u_3^{(3)} = 1$. Deci,

$$\boldsymbol{u}^{(3)} = \pm \boldsymbol{e}_3.$$

Acum putem scrie tensorul S sub forma

$$\mathbf{S} = 12\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\,\mathbf{e}_1 + \frac{1}{2}\,\mathbf{e}_2\right)\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\,\mathbf{e}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{e}_2\right) +$$

$$+ 8\left(\frac{1}{2}\,\mathbf{e}_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}\,\mathbf{e}_2\right)\left(\frac{1}{2}\,\mathbf{e}_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{e}_2\right) + 7\,\mathbf{e}_3\,\mathbf{e}_3.$$

Exemplul 2. Să reducem la axele principale tensorul

$$\mathbf{S} = 4(\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2\mathbf{e}_2) + \mathbf{e}_3\mathbf{e}_3 - (\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2\mathbf{e}_1).$$

Pentru determinarea valorilor proprii avem ecuația

$$\begin{vmatrix} 4-S & -1 & 0 \\ -1 & 4-S & 0 \\ 0 & 0 & 3-S \end{vmatrix} = 0.$$

Rezolvînd-o, găsim

$$S_{(1)} = 5,\ \ S_{(2)} = 3,\ \ S_{(3)} = 3.$$

În acest caz este suficient să se determine numai un singur vector propriu, $\boldsymbol{k}$, care corespunde lui $S_{\text{I}} = 5$. Îl vom afla din sistemul de ecuații

$$-k_1 - k_2 = 0,$$
$$-k_1 - k_2 = 0,$$
$$-2k_3 = 0.$$

De aici,

$$\boldsymbol{k} = \pm\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\,\mathbf{e}_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\,\mathbf{e}_2\right),$$

iar tensorul S se scrie sub forma (19.10),

$$\mathbf{S} = 3\,\mathbf{I} + 2\,\frac{\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2}{\sqrt{2}}.$$

În cazul general, pentru calcularea valorilor proprii ale unui tensor, S_{ij}, trebuie să-l descompunem în partea sferică, $1/3\,S_{kk}\,\delta_{ij}$, și în deviatorul $D_{ij} = S_{ij} - 1/3\,S_{kk}\,\delta_{ij}$. În continuare se calculează cei doi invarianți ai deviatorului: parametrul de scară

$$\theta = \sqrt{-\frac{1}{6}\,\delta_{ikm}\,\delta_{jlm}\,D_{ij}\,D_{kl}} = \sqrt{\frac{1}{6}\,D_{ij}\,D_{ij}} \tag{19.12}$$

și unghiul ψ, cuprins în limitele $(-\pi/6,\ \pi/6)$ și care este definit de condiția

$$\sin 3\psi = -\frac{\det \mathbf{D}}{2\theta^3}. \tag{19.13}$$

Valorile proprii, $D_{(i)}$, ale deviatorului **D** (ele se numerotează în ordine crescătoare) se exprimă prin acești invarianți astfel

$$D_{(1)} = -2\theta \sin(\pi/3 + \psi),$$
$$D_{(2)} = 2\theta \sin \psi, \qquad (19.14)$$
$$D_{(3)} = 2\theta \sin(\pi/3 - \psi).$$

Aceasta se poate verifica ușor, înlocuind oricare dintre valori în ecuația caracteristică a deviatorului. Valorile proprii ale tensorului **S** sînt egale cu

$$S_{(i)} = D_{(i)} + \frac{1}{3} S_{kk}. \qquad (19.15)$$

§ 20. MICILE VARIAȚII ALE TENSORULUI SIMETRIC DE RANGUL DOI

Rezolvarea multor probleme ale fizicii cristalelor este legată de următoarea problemă de algebră tensorială: se cunosc valorile proprii $S_{(i)}$ și vectorii proprii $\boldsymbol{u}_i$ (în calculele ce urmează este mai comod să notăm vectorii proprii cu $\boldsymbol{u}_i$ și nu cu $\boldsymbol{u}^{(i)}$, ca în paragrafele precedente) ale unui tensor simetric de rangul doi, **S**. Cum vor varia ele în cazul unei variații mici, date, a tensorului **S**?

Vom considera mai întîi cazul în care toate cele trei valori proprii ale tensorului inițial, **S**, sînt diferite. Adăugăm tensorului **S** un mic tensor simetric ζ; dacă el este într-adevăr mic față de **S**, atunci tensorul $\mathbf{S} + \zeta$ trebuie să se deosebească puțin de tensorul **S**. Deosebirile se vor manifesta, în primul rînd, prin mici modificări ale valorilor proprii, iar în al doilea rînd, printr-o mică rotire a tripletului de vectori proprii. Pentru ca variațiile $\xi_{(i)}$ ale valorilor proprii să fie mici, toate componentele tensorului ζ trebuie să fie cu mult mai mici, în valoarea absolută, decît valorile proprii ale tensorului **S**

$$|\zeta_{kl}| \ll |S_{(i)}|.$$

Iar pentru ca și rotația tripletului de vectori proprii să fie mică, componentele tensorului ζ trebuie să fie cu mult mai mici, în valoare absolută, decît diferențele dintre valorile proprii ale tensorului

$$|\zeta_{kl}| \ll |S_{(i)} - S_{(j)}|.$$

Noile valori proprii modificate, $S_{(i)} + \xi_{(i)}$, și noii vectori proprii modificați $\boldsymbol{u}_i + \delta\boldsymbol{u}_i$, satisfac ecuația

$$(\mathbf{S} + \zeta)\cdot(\boldsymbol{u}_i + \delta\boldsymbol{u}_i) = (S_{(i)} + \xi_{(i)})(\boldsymbol{u}_i + \delta\boldsymbol{u}_i). \qquad (20.1)$$

Fără a micșora generalitatea, se pot considera vectorii $\boldsymbol{u}_i$ unitari. Vom impune condiția ca și vectorii $\boldsymbol{u}_i + \delta\boldsymbol{u}_i$ modificați să fie tot unitari; pe lîngă aceasta, așa cum știm, ei trebuie să fie ortogonali între ei

$$(\boldsymbol{u}_i + \delta\boldsymbol{u}_i)\cdot(\boldsymbol{u}_j + \delta\boldsymbol{u}_j) = \delta_{ij}.$$

Desfăcînd parantezele, obținem

$$\boldsymbol{u}_i \cdot \delta \boldsymbol{u}_j + \boldsymbol{u}_j \cdot \delta \boldsymbol{u}_i + \delta \boldsymbol{u}_i \cdot \delta \boldsymbol{u}_j = 0. \tag{20.2}$$

Să descompunem vectorii $\delta \boldsymbol{u}_i$ după baza $\boldsymbol{u}_1$, $\boldsymbol{u}_2$, $\boldsymbol{u}_3$

$$\delta \boldsymbol{u}_i = \omega_{ik} \boldsymbol{u}_k. \tag{20.3}$$

Coeficienții acestei dezvoltări sînt

$$\omega_{ij} = \delta \boldsymbol{u}_i \cdot \boldsymbol{u}_j. \tag{20.4}$$

Din egalitatea (20.2), dacă se neglijează termenii mai mici cu două ordine de mărime, rezultă antisimetricitatea tensorului

$$\omega_{ji} + \omega_{ij} = 0. \tag{20.5}$$

Iar de aici, rezultă, la rîndul său, că creșterea $\delta \boldsymbol{u}_i$ a fiecărui vector propriu, $\boldsymbol{u}_i$, este perpendiculară la acest vector. Într-adevăr, conform formulei (20.4) produsul scalar dintre vectorul propriu și creșterea sa este egal cu una dintre componentele diagonale ale tensorului $\boldsymbol{\omega}$, toate aceste componente, în virtutea egalității (20.5), fiind egale cu zero.

Să desfacem acum parantezele în formula (20.1), punînd, pentru a fixa ideile $\boldsymbol{u}_i = \boldsymbol{u}_1$ și, respectiv, $S_{(i)} = S_{(1)}$

$$\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{u}_1 + \mathbf{S} \cdot \delta \boldsymbol{u}_1 + \zeta \cdot \boldsymbol{u}_1 = S_{(1)} \boldsymbol{u}_1 + S_{(1)} \delta \boldsymbol{u}_1 + \xi_{(1)} \boldsymbol{u}_{(1)}.$$

Aici am eliminat, de la bun început, termenii mai mici cu două ordine de mărime. Avînd în vedere că

$$\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{u}_1 = S_{(1)} \boldsymbol{u}_1 \tag{20.6}$$

și utilizînd dezvoltarea (20.4), să transcriem (20.6) sub forma

$$\omega_{12} \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{u}_2 + \omega_{13} \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{u}_3 + \zeta \cdot \boldsymbol{u}_1 = \omega_{12} S_{(1)} \boldsymbol{u}_2 + \omega_{13} S_{(1)} \boldsymbol{u}_3 + \xi_{(1)} \boldsymbol{u}_1.$$

Dar

$$\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{u}_2 = S_{(2)} \boldsymbol{u}_2,$$

iar

$$\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{u}_3 = S_{(3)} \boldsymbol{u}_3.$$

Deci

$$\zeta \cdot \boldsymbol{u}_1 = \xi_{(1)} \boldsymbol{u}_1 + \omega_{12} (S_{(1)} - S_{(2)}) \boldsymbol{u}_2 + \omega_{13} (S_{(1)} - S_{(2)}) \boldsymbol{u}_3 \cdot \tag{20.7}$$

Înmulțind scalar ambele părți ale egalității (20.7) succesiv cu $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2$ și $\boldsymbol{u}_3$, vom obține rezultatele căutate

$$\xi_{(1)} = \boldsymbol{u}_1 \cdot \zeta \cdot \boldsymbol{u}_1, \ \omega_{12} = \frac{\boldsymbol{u}_2 \cdot \zeta \cdot \boldsymbol{u}_1}{S_{(1)} - S_{(2)}}, \ \omega_{13} = \frac{\boldsymbol{u}_3 \cdot \zeta \cdot \boldsymbol{u}_1}{S_{(1)} - S_{(3)}} \cdot \tag{20.8}$$

Celelalte valori și componente proprii ale tensorului se calculează analog.

Dacă tensorul ζ este definit prin componentele sale ζ_{ij} în sistemul axelor principale ale tensorului **S**, atunci soluţia problemei puse se scrie sub forma

$$\begin{aligned}
\xi_{(1)} &= \zeta_{11}, \qquad \omega_{23} = -\omega_{32} = \frac{\zeta_{23}}{S_{(2)} - S_{(3)}}, \\
\xi_{(2)} &= \zeta_{22}, \qquad \omega_{31} = -\omega_{13} = \frac{\zeta_{31}}{S_{(3)} - S_{(1)}}, \qquad (20.9) \\
\xi_{(3)} &= \zeta_{33}, \qquad \omega_{12} = -\omega_{21} = \frac{\zeta_{12}}{S_{(1)} - S_{(2)}}.
\end{aligned}$$

Tensorul antisimetric $\boldsymbol{\omega}$ defineşte rotaţia mică a tripletului vectorilor proprii. Pentru ca această rotaţie să fie într-adevăr mică, trebuie ca toate componentele tensorului $\boldsymbol{\omega}$ să fie mult mai mici ca unitatea, pentru aceasta fiind necesar, aşa cum se vede din formulele (20.9), ca componentele tensorului $\boldsymbol{\omega}$ să fie, la rîndul lor mici, nu numai în comparaţie cu valorile proprii ale tensorului **S**, ci şi în comparaţie cu diferenţele dintre ele.

Să trecem acum la examinarea celuilalt caz: tensorul **S** are două valori proprii care coincid ($S_\perp$), iar cea de a treia este diferită de primele două ($S_{||}$). În acest caz, problema se complică considerabil. Tensorul **S** are acum un singur vector propriu $\boldsymbol{u}$, care corespunde valorii proprii $S_{||}$, şi un întreg plan propriu, care corespunde valorii dublu proprii, $S_\perp$. Tensorul modificat, $\mathbf{S} + \zeta$, are însă în general vorbind, trei vectori proprii; unul dintre ei, $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{u} + \delta\boldsymbol{u}$, este vecin cu $\boldsymbol{u}$, ceilalţi doi aflîndu-se undeva în planul perpendicular pe acesta.

Fie $\boldsymbol{q}_1$, $\boldsymbol{q}_2$ şi $\boldsymbol{v}$ vectorii proprii unitari ai tensorului $\mathbf{S} + \zeta$, iar $\boldsymbol{p}_1$ şi $\boldsymbol{p}_2$, proiecţiile vectorilor $\boldsymbol{q}_1$ şi $\boldsymbol{q}_2$ pe planul propriu al tensorului **S**; se poate scrie

$$\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{p}_1 + \omega_{13}\boldsymbol{u}, \quad \boldsymbol{q}_2 = \boldsymbol{p}_2 + \omega_{23}\boldsymbol{u}, \quad \boldsymbol{v} = \omega_{31}\boldsymbol{p}_1 + \omega_{32}\boldsymbol{p}_2 + \boldsymbol{u}. \qquad (20.10)$$

Din faptul că tripletul vectorilor proprii este ortonormat, rezultă că (în limitele preciziei considerate) vectorii $\boldsymbol{p}_1$ şi $\boldsymbol{p}_2$ sînt unitari şi perpendiculari între ei, iar tensorul $\boldsymbol{\omega}$ este antisimetric.

În ecuaţiile pentru valorile proprii şi pentru vectorii proprii

$$\begin{aligned}
(\mathbf{S} + \zeta) \cdot \boldsymbol{q}_1 &= (S_\perp + \xi_{(1)})\boldsymbol{q}_1, \\
(\mathbf{S} + \zeta) \cdot \boldsymbol{q}_2 &= (S_\perp + \xi_{(2)})\boldsymbol{q}_2, \qquad (20.11) \\
(\mathbf{S} + \zeta) \cdot \boldsymbol{v} &= (S_{||} + \xi_{(3)})\boldsymbol{v},
\end{aligned}$$

înlocuim expresia vectorilor proprii (20.10) şi efectuăm produsul scalar termen cu termen, neglijînd termenii mai mici cu două ordine de mărime. După reducerea termenilor asemenea, obţinem

$$\begin{aligned}
\zeta \cdot \boldsymbol{q}_1 &= \xi_{(1)}\boldsymbol{p}_1 + (S_{||} - S_\perp)\omega_{31}\boldsymbol{u}, \\
\zeta \cdot \boldsymbol{p}_2 &= \xi_{(2)}\boldsymbol{p}_2 + (S_{||} - S_\perp)\omega_{32}\boldsymbol{u}, \qquad (20.12) \\
\zeta \cdot \boldsymbol{u} &= (S_{||} - S_\perp)(\omega_{31}\boldsymbol{p}_1 + \omega_{32}\boldsymbol{p}_2) + \xi_{(3)}\boldsymbol{u}.
\end{aligned}$$

Înmulţind scalar egalitatea vectorială (20.12) succesiv cu $\boldsymbol{p}_1$, $\boldsymbol{p}_2$ şi $\boldsymbol{u}$, ajungem la şase relaţii

$$\boldsymbol{u}\cdot\zeta\cdot\boldsymbol{u} = \xi_{(3)}; \tag{20.13}$$

$$\boldsymbol{p}_1\cdot\zeta\cdot\boldsymbol{p}_1 = \xi_{(1)},\ \boldsymbol{p}_2\cdot\zeta\cdot\boldsymbol{p}_2 = \xi_{(2)},\ \boldsymbol{p}_1\cdot\zeta\cdot\boldsymbol{p}_2 = 0; \tag{20.14}$$

$$\boldsymbol{u}\cdot\zeta\cdot\boldsymbol{p}_1 = (S_{\|} - S_{\perp})\omega_{31},\ \boldsymbol{u}\cdot\zeta\cdot\boldsymbol{p}_2 = (S_{\|} - S_{\perp})\omega_{32}, \tag{20.15}$$

pe care, pentru comoditate, le-am aranjat în trei grupuri.

Relaţia (20.13) este formula care permite calcularea directă a lui $\xi_{(3)}$.

Vectorii $\boldsymbol{p}_1$ şi $\boldsymbol{p}_2$ ne sînt deocamdată necunoscuţi, însă relaţiile (20.14) arată că sînt vectorii proprii ai unui tensor bidimensional $\zeta_{\perp}$ — proiecţiile tensorului ζ pe planul propriu al tensorului S. În mod corespunzător, $\xi_{(1)}$ şi $\xi_{(2)}$ sînt valorile proprii ale acestui tensor bidimensional.

Fie un tensor ζ, dat prin matricea componentelor sale $|\zeta_{ij}|$ într-un sistem de coordonate construit pe versorii $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{u}$, unde $\boldsymbol{e}_1$, şi $\boldsymbol{e}_2$ sînt doi vectori arbitrari, perpendiculari între ei, din planul propriu al tensorului S. Atunci tensorul bidimensional $\zeta_{\perp}$ în sistemul de coordonate construit pe versorii $\boldsymbol{e}_1$ şi $\boldsymbol{e}_2$ este dat prin matricea componentelor

$$\|\zeta_{ij}^{\perp}\| = \begin{Vmatrix} \zeta_{11} & \zeta_{12} \\ \zeta_{12} & \zeta_{22} \end{Vmatrix}$$

Valorile sale proprii $\xi_{(1)}$ şi $\xi_{(2)}$ sînt rădăcini ale ecuaţiei de gradul doi

$$\begin{vmatrix} \zeta_{11} - \xi & \zeta_{12} \\ \zeta_{12} & \zeta_{22} - \zeta \end{vmatrix} = 0. \tag{20.16}$$

Ele sînt egale cu

$$\xi_{(1,2)} = \frac{1}{2}[(\zeta_{11} + \zeta_{22}) \pm \sqrt{(\zeta_{11} - \zeta_{22})^2 + (2\zeta_{12})^2}]. \tag{20.17}$$

Acum putem găsi uşor şi vectorii proprii ai tensorului $\zeta_{\perp}$

$$\boldsymbol{p}_1 = \frac{\zeta_{12}\boldsymbol{e}_1 + (\xi_{(1)} - \zeta_{11})\boldsymbol{e}_2}{\sqrt{(\xi_{(1)} - \zeta_{11})^2 + \zeta_{12}^2}},\ \boldsymbol{p}_2 = \frac{(\xi_{(2)} - \zeta_{22})\boldsymbol{e}_1 + \zeta_{12}\boldsymbol{e}_2}{\sqrt{(\xi_{(2)} - \zeta_{22})^2 + \zeta_{12}^2}}. \tag{20.18}$$

Astfel, relaţiile (20.14) sînt folosite integral.

Cunoscînd vectorii $\boldsymbol{p}_1$ şi $\boldsymbol{p}_2$, se pot acum găsi, din relaţia (20.15), coeficienţii ω_{31} şi ω_{32}. Evident

$$\omega_{31} = \frac{\zeta_{12}\zeta_{31} + \zeta_{23}(\xi_{(1)} - \zeta_{11})}{\sqrt{(S_{\|} - S_{\perp})(\xi_{(1)} - \zeta_{11})^2 + \zeta_{12}^2}},$$

$$\omega_{32} = \frac{\zeta_{12}\zeta_{23} + \zeta_{31}(\xi_{(2)} - \zeta_{22})}{(S_{\|} - S_{\perp})\sqrt{(\xi_{(2)} - \zeta_{22})^2 + \zeta_{12}^2}}. \tag{20.19}$$

După aceasta, cu ajutorul formulelor (20.10) se pot determina în fine, vectorii proprii q_1, q_2 și v ai tensorului $S + \zeta$. Problema este complet rezolvată.

Cazul în care toate valorile proprii ale tensorului S coincid este, evident, inutil să fie studiat. Vectorii proprii ai tensorului $S + \zeta$ coincid în acest caz cu vectorii proprii ai tensorului ζ, iar corecțiile corespunzătoare la valorile proprii sînt egale cu valorile proprii ale tensorului ζ.

§ 21. COMPONENTE NORMALE ȘI COMPONENTE TANGENȚIALE ALE UNUI TENSOR SIMETRIC DE RANGUL DOI

Se numește *componentă normală* a unui tensor simetric de rangul doi, S, după direcția vectorului unitar $\boldsymbol{n}$, numărul egal cu

$$\boldsymbol{n} \cdot \mathrm{S} \cdot \boldsymbol{n} = S_{ij}\, n_i\, n_j. \tag{21.1}$$

Dacă vectorul unitar $\boldsymbol{n}$ se ia drept unul dintre versorii sistemului de coordonate nou, $X_{1'}$, $X_{2'}$, $X_{3'}$ (de pildă $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_1$), atunci componenta normală va fi pur și simplu componenta diagonală, corespunzătoare tensorului în sistemul $X_{1'}$, $X_{2'}$, $X_{3'}$; în exemplul considerat,

$$\boldsymbol{n} \cdot \mathrm{S} \cdot \boldsymbol{n} = S_{1'1'}. \tag{21.2}$$

În sistemul de coordonate construit pe axele principale ale tensorului, formulele pentru calcularea componentei sale normale capătă o formă deosebit de simplă. Considerînd că n_i sînt componentele vectorului unitar $\boldsymbol{n}$ după sistemul de coordonate propriu al tensorului S, obținem

$$\boldsymbol{n} \cdot \mathrm{S} \cdot \boldsymbol{n} = S_{(1)} n_1^2 + S_{(2)} n_2^2 + S_{(3)} n_3^2. \tag{21.3}$$

Dacă, în particular, două dintre valorile proprii ale tensorului S coincid, atunci componenta lui normală depinde numai de componenta $n_3 = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{k}$

$$\boldsymbol{n} \cdot \mathrm{S} \cdot \boldsymbol{n} = S_{\perp}(1 - n_3^2) + S_{\parallel}\, n_3^2 = S_{\perp} + (S_{\parallel} - S_{\perp}) n_3^2.$$

În sfîrșit, cînd toate cele trei valori proprii ale tensorului coincid, componenta normală este $\boldsymbol{n}\cdot\mathrm{S}\cdot\boldsymbol{n} = S$.

Cunoscînd cele șase componente normale ale tensorului simetric de rangul doi, S, se pot calcula, în general, toate celelalte componente ale tensorului. Ele se determină ca soluție a sistemului de șase ecuații liniare cu șase necunoscute

$$n_i^{(\mu)}\, n_j^{(\mu)}\, S_{ij} = \alpha_{(\mu)} \quad (\mu = 1, \ldots, 6), \tag{21.4}$$

în care componentele vectorilor unitari, $\boldsymbol{n}^{(\mu)}$ și componentele normale corespunzătoare, $\alpha_{(\mu)}$, se presupun cunoscute. Pentru rezolvarea acestui sistem este necesar și suficient ca determinantul lui să fie diferit de zero

$$\begin{vmatrix} (n_1^{(1)})^2 & (n_2^{(1)})^2 & (n_3^{(1)})^2 & 2n_2^{(1)}\,n_3^{(1)} & 2n_3^{(1)}\,n_1^{(1)} & 2n_1^{(1)}\,n_2^{(1)} \\ (n_2^{(2)})^2 & (n_2^{(2)})^2 & (n_3^{(2)})^2 & 2n_2^{(2)}\,n_3^{(2)} & 2n_3^{(2)}\,n_1^{(2)} & 2n_1^{(2)}\,n_2^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ (n_1^{(6)})^2 & (n_2^{(6)})^2 & (n_3^{(6)})^2 & 2n_2^{(6)}\,n_3^{(6)} & 2n_3^{(6)}\,n_1^{(6)} & 2n_1^{(6)}\,n_2^{(6)} \end{vmatrix} \neq 0. \tag{21.5}$$

Este clar că nu orice set de șase vectori unitari, $\boldsymbol{n}^{(\mu)}$, satisface condiția (21.5), dar se pot desemna fără dificultate astfel de seturi care satisfac această condiție; de exemplu,

$$\boldsymbol{n}^{(1)} = \boldsymbol{e}_1, \qquad \boldsymbol{n}^{(2)} = \boldsymbol{e}_2, \qquad \boldsymbol{n}^{(3)} = \boldsymbol{e}_3, \tag{21.6}$$

$$\boldsymbol{n}^{(4)} = \frac{\boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3}{\sqrt{2}}, \quad \boldsymbol{n}^{(5)} = \frac{\boldsymbol{e}_3 + \boldsymbol{e}_1}{\sqrt{2}}, \quad \boldsymbol{n}^{(6)} = \frac{\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2}{\sqrt{2}}.$$

Componentele normale apar adesea la rezolvarea unor probleme ale fizicii cristalelor, căpătînd astfel o valoare practică însemnată întrebarea: care este direcția vectorului $\boldsymbol{n}$ pentru care componenta normală a unui tensor dat, $\mathbf{S}$, va lua valorile extreme? Cu cine sînt egale aceste valori? Se presupune că tensorul $\mathbf{S}$ este dat prin componentele sale, S_{ij}, într-un anumit sistem de coordonate, X_1, X_2, X_3.

Formularea matematică a acestei probleme este următoarea: să se găsească valorile n_i, pentru care forma pătratică

$$F(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{n}\cdot\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{n} = S_{ij}\,n_i\,n_j \tag{21.7}$$

atinge extremul, fiind practic satisfăcută condiția suplimentară

$$f(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n} - 1 = n_i\,n_i - 1 = 0. \tag{21.8}$$

Aceasta este o problemă tipică de determinare a unui extrem condiționat. Astfel de probleme se rezolvă prin metoda multiplicatorilor nedeterminați ai lui Lagrange: se ia funcția

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = F(\boldsymbol{n}) - \lambda f(\boldsymbol{n}) \tag{21.9}$$

cu factorul λ deocamdată nedeterminat şi se determină extremul ei absolut prin procedeul obişnuit, adică se anulează derivatele sale parţiale

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n_i} = 0, \qquad (21.10)$$

iar apoi, din ecuaţiile (21.10) şi (21.8) se găsesc componentele n_i şi factorul λ. Ecuaţiile (21.10) capătă, în cazul nostru, forma

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n_i} = \frac{\partial F}{\partial n_i} - \lambda \frac{\partial f}{\partial n_i} = S_{ij} n_j + S_{ji} n_j - 2\lambda n_i = 0,$$

adică (ţinînd cont de faptul că tensorul **S** este simetric)

$$S_{ij}\, n_j = \lambda n_i, \quad \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{n} = \lambda \boldsymbol{n}, \qquad (21.11)$$

dar aceasta nu este altceva decît tocmai condiţia ca $\boldsymbol{n}$ să fie unul dintre vectorii proprii ai tensorului **S**, iar λ, valoarea proprie corespunzătoare acestui vector.

Astfel, componenta normală a unui tensor îşi atinge valorile extreme în direcţiile vectorilor proprii ale acestui tensor. Mai mult chiar, aceste valori extreme sînt egale cu valorile proprii corespunzătoare tensorului, dat fiind că din (21.11) şi (21.8) rezultă

$$\boldsymbol{n} \cdot \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{n} = S_{ij} n_i\, n_j = \lambda n_i n_i = \lambda. \qquad (21.12)$$

Din cele demonstrate mai rezultă şi că dacă toate valorile proprii ale unui tensor sînt pozitive (negative), atunci şi toate componentele lui normale au această proprietate. Dacă printre valorile proprii ale tensorului există şi valori proprii pozitive şi valori proprii negative, componenta normală a tensorului ia, de asemenea, atît valori pozitive cît şi valori negative. Fiind o funcţie continuă de direcţie, rezultă că, pentru un anumit con al direcţiilor, ea trebuie să fie egală cu zero.

Să trecem la examinarea componentelor tangenţiale ale unui tensor simetric de rangul doi. Fie **S** un tensor simetric de rangul doi, iar $\boldsymbol{p}$ şi $\boldsymbol{q}$ vectori unitari reciproc perpendiculari

$$\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{p} = 1, \ \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{q} = 1, \ \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{q} = 0. \qquad (21.13)$$

Se numeşte *componentă tangenţială* a tensorului **S** după direcţiile $\boldsymbol{p}$ şi $\boldsymbol{q}$ numărul

$$\boldsymbol{p} \cdot \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{q} = S_{ij}\, p_i\, q_j. \qquad (21.14)$$

Deoarece tensorul $\mathbf{S}$ este simetric, direcţiile $\boldsymbol{p}$ şi $\boldsymbol{q}$ din această definiţie sînt echivalente şi interşanjabile. Folosind faptul că vectorii unitari $\boldsymbol{p}$ şi $\boldsymbol{q}$ sînt reciproc perpendiculari, se poate construi pe aceştia, luaţi ca versori, un nou sistem de coordonate $X_{1'}$, $X_{2'}$, $X_{3'}$

$$\boldsymbol{e}_{1'} = \boldsymbol{p}, \ \boldsymbol{e}_{2'} = \boldsymbol{q}, \ \boldsymbol{e}_{3'} = \boldsymbol{p} \times \boldsymbol{q}.$$

În noul sistem, componenta tangenţială va fi

$$\boldsymbol{p} \cdot \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{q} = S_{1'2'}. \tag{21.15}$$

În timp ce componentele maximale corespund componentelor diagonale ale tensorului, cele tangenţiale corespund componentelor nediagonale.

În sistemul de coordonate propriu, componentele tangenţiale se exprimă prin următoarele formule : în cazul general

$$\boldsymbol{p} \cdot \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{q} = S_{(1)}\, p_1 q_1 + S_{(2)}\, p_2 q_2 + S_{(3)}\, p_3 q_3, \tag{21.16}$$

cînd două valori proprii coincid

$$\boldsymbol{p} \cdot \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{q} = (S_{\parallel} - S_{\perp})\, p_3 q_3, \tag{21.17}$$

şi, în sfîrşit, în cazul cînd cele trei valori proprii coincid

$$\boldsymbol{p} \cdot \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{q} = 0. \tag{21.18}$$

Deoarece componentele tangenţiale ale unui tensor sferic sînt egale cu zero, este clar că componentele tangenţiale ale oricărui tensor coincid cu componentele tangenţiale ale deviatorului lui. De aici rezultă că avînd setul de componente tangenţiale, nu se poate reconstitui întregul tensor, ci în cel mai bun caz, numai deviatorul său. Pentru aceasta sînt suficiente cele cinci componente tangenţiale.

Pentru componentele tangenţiale, problema de extremum se complică substanţial faţă de aceeaşi problemă pentru componentele normale, însă se rezolvă prin aceeaşi metodă. Se cere să se determine valorile p_i şi q_i pentru care forma biliniară atinge extremul

$$F(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = S_{ij}\, p_i q_j \tag{21.19}$$

şi care să satisfacă condiţiile suplimentare

$$\varphi(\boldsymbol{p}) = p_i p_i - 1 = 0, \qquad \varphi(\boldsymbol{q}) = q_i q_i - 1 = 0, \qquad \psi(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = p_i q_i = 0. \tag{21.20}$$

Să luăm funcția

$$\Phi(\boldsymbol{p},\ \boldsymbol{q}) = F(\boldsymbol{p},\ \boldsymbol{q}) - \frac{1}{2}\lambda'\varphi(\boldsymbol{p}) - \frac{1}{2}\lambda''\varphi(\boldsymbol{q}) - \mu\psi(\boldsymbol{p},\ \boldsymbol{q}), \qquad (21,21)$$

în care λ', λ'' și μ sînt multiplicatori Lagrange nedeterminați, iar din ecuațiile

$$\frac{\partial\Phi}{\partial p_i} = 0, \qquad \frac{\partial\Phi}{\partial q_i} = 0 \qquad (21.22)$$

și (21.20) determinăm atît vectorii ce ne interesează, $\boldsymbol{p}$ și $\boldsymbol{q}$, cît și valorile multiplicatorilor Lagrange. Ținînd seama totodată de faptul că tensorul S este simetric, ecuațiile (21.22) dau

$$S_{ij}\,q_j - \lambda'\,p_i - \mu\,q_i = 0,$$

$$S_{ij}\,p_j - \lambda''\,q_i - \mu\,p_i = 0. \qquad (21.23)$$

Scrise sub formă vectorială, aceste șase ecuații se reduc la două

$$\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{q} - \lambda'\boldsymbol{p} - \mu\,\boldsymbol{q} = 0, \qquad (21.24)$$

$$\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{p} - \lambda''\boldsymbol{q} - \mu\,\boldsymbol{p} = 0.$$

Înmulțind scalar prima dintre ele cu $\boldsymbol{q}$, iar pe a doua cu $\boldsymbol{p}$, găsim

$$\mu = \boldsymbol{q}\cdot\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{q} = \boldsymbol{p}\cdot\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{p}; \qquad (21.25)$$

și viceversa, înmulțind scalar prima ecuație (21.24) cu $\boldsymbol{p}$, iar pe a doua cu $\boldsymbol{q}$ găsim

$$\lambda' = \lambda'' = \boldsymbol{p}\cdot\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{q}; \qquad (21.26)$$

notăm această mărime, pur și simplu, cu λ. Utilizînd această notație vom aduna una cu alta și vom scădea una din alta ecuațiile vectoriale (21.24); pentru a avea de-a face, ca și pînă acum, cu vectori unitari, mai împărțim încă suma și diferența lor la $\sqrt{2}$. În final ajungem la ecuațiile vectoriale

$$\mathbf{S}\cdot\frac{\boldsymbol{q}+\boldsymbol{p}}{\sqrt{2}} - (\mu+\lambda)\,\frac{\boldsymbol{q}+\boldsymbol{p}}{\sqrt{2}} = 0,$$

$$\mathbf{S}\cdot\frac{\boldsymbol{q}-\boldsymbol{p}}{\sqrt{2}}(-\mu-\lambda)\,\frac{\boldsymbol{q}-\boldsymbol{p}}{\sqrt{2}} = 0, \qquad (21.27)$$

care arată că $(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{p})/\sqrt{2}$ și $(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{p})/\sqrt{2}$ sînt vectorii proprii ai tensorului S, iar $\mu+\lambda$ și $\mu-\lambda$ sînt valorile lor proprii respective.

Fie, de pildă

$$\frac{\boldsymbol{q}+\boldsymbol{p}}{\sqrt{2}}=\boldsymbol{u}^{(1)}, \qquad \frac{\boldsymbol{q}-\boldsymbol{p}}{\sqrt{2}}=\boldsymbol{u}^{(2)},$$

atunci

$$\mu+\lambda=S_{(1)}, \ \mu-\lambda=S_{(2)}$$

De aici obținem

$$\boldsymbol{q}=\frac{\boldsymbol{u}^{(1)}+\boldsymbol{u}^{(2)}}{\sqrt{2}}, \qquad \boldsymbol{p}=\frac{\boldsymbol{u}^{(1)}-\boldsymbol{u}^{(2)}}{\sqrt{2}},$$

$$\lambda=\frac{S_{(1)}-S_{(2)}}{2}, \qquad \mu=\frac{S_{(1)}+S_{(2)}}{2};$$

schimbînd rolurile vectorilor $\boldsymbol{u}^{(1)}$ și $\boldsymbol{u}^{(2)}$, am fi obținut

$$\lambda=\frac{S_{(2)}-S_{(1)}}{2}.$$

Evident, maximul funcției

$$F(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})=\boldsymbol{p}\cdot\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{q}=S_{ij}p_i q_j$$

este egal cu semidiferența dintre cea mai mare și cea mai mică valoare proprie a tensorului $\mathbf{S}$, minimul fiind egal cu aceeași semidiferență cu semnul schimbat. Direcțiile $\boldsymbol{p}$ și $\boldsymbol{q}$, după care funcția F atinge valorile extreme, sînt bisectoarele unghiurilor dintre vectorii proprii ce corespund celei mai mari și, respectiv celei mai mici valori proprii.

§ 22. SIMETRIA EXTERIOARĂ ȘI REPREZENTAREA VECTORILOR ȘI TENSORILOR DE RANGUL DOI

Dacă într-o transformare oarecare de coordonate toate componentele unui tensor rămîn neschimbate, se spune că tensorul este *invariant* față de acea transformare. Mulțimea transformărilor ortogonale față de care un tensor dat este invariant constituie *grupul simetriei lui exterioare*. Vom analiza simetria exterioară a vectorilor și a tensorilor simetrici de rangul doi (Șubnikov, 1949)-

Însăși reprezentarea unui vector sub formă de săgeată sugerează că grupul lui de simetrie este grupul limită Curie, ∞m- axa de simetrie coincizînd cu direcția vectorului. Pentru a demonstra aceasta, să alegem sistemul de coordonate vechi, astfel încît axa X_3 să fie orientată după vectorul nostru, $\boldsymbol{v}$. Aceasta înseamnă că

$$v_1=v_2=0, \ v_3=v \quad \text{sau} \quad v_k=v\,\delta_{k3}.$$

Prin urmare în orice sistem de coordonate nou componentele vectorului $\boldsymbol{v}$ vor fi egale cu $v_{i'} = c_{i'3}\, v$. Pentru ca și în sistemul nou să fie valabilă egalitatea $v_{i'} = v\delta_{i'3}$ este necesar ca $c_{i'3} = \delta_{i'3}$. Se poate arăta, fără dificultate, că toate matricele ortogonale, care satisfac această condiție pot fi reprezentate în una dintre următoarele două forme

$$\left\| \begin{array}{ccc} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \right\|, \quad \left\| \begin{array}{ccc} -\cos 2\psi & -\sin 2\psi & 0 \\ -\sin 2\psi & \cos 2\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \right\|, \qquad (22.1)$$

$$0 \leqslant \varphi < 2\pi,$$

$$0 \leqslant \psi < \pi.$$

Tabelul 17.1 arată că acestea sînt matrice ale grupului ∞m, iar axa ∞ coincide cu X_3, adică cu vectorul $\boldsymbol{v}$.

In cadrul studiului simetriei unui tensor de rangul doi, este necesar să se distingă trei cazuri, corespunzător numărului de valori proprii ale tensorului respectiv, care coincid. Dacă toate cele trei valori proprii ale tensorului coincid, adică $\mathbf{S} = S\mathbf{I}$, atunci el este invariant față de orice transformări ortogonale. Grupul lui de simetrie este $\infty\infty m$, iar tensorul se numește tensor *izotrop* sau *sferic*.

În cazul în care coincid două valori proprii, tensorul $\mathbf{S}$ este

$$\mathbf{S} = S_{\perp}\mathbf{I} + (S_{||} - S_{\perp})\boldsymbol{k}\,\boldsymbol{k}.$$

Să alegem sistemul vechi de coordonate astfel încît axa X_3 să coincidă cu direcția $\boldsymbol{k}$. Deoarece primul termen al sumei este indiscutabil invariant față de orice transformări ortogonale, îl vom analiza numai pe al doilea. În sistemul vechi singura lui componentă, diferită de zero, era

$$S_{33}^{(2)} = S_{||} - S_{\perp}.$$

Rezultă deci că în orice sistem de coordonate nou, componentele lui vor fi

$$S_{i'j'}^{(2)} = c_{i'3}\, c_{j'3}\, S_{33}^{(2)}.$$

Pentru ca în sistemul nou, componentele să fie aceleași ca în sistemul vechi, trebuie ca $c_{i'3} = \pm\delta_{i'3}$. Toate matricele ortogonale,

care satisfac această condiţie, pot fi reprezentate, pentru $c_{i'3}=\delta_{i'3'}$ într-una dintre formele (22.1), iar pentru $c_{i'3} = \delta_{i'3}$ în una dintre formele

$$\begin{Vmatrix} -\cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & -\cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}, \quad \begin{Vmatrix} \cos 2\psi & \sin 2\psi & 0 \\ \sin 2\psi & -\cos 2\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}, \tag{22.2}$$

$$0 \leqslant \varphi < 2\pi,$$

$$0 \leqslant \psi < 2\pi.$$

După cum se vede din tabelul 17.1, matricele celor patru forme enumerate, (22.1) şi (22.2), formează, în ansamblu, grupul ∞/mm. Axa acestui grup este orientată după vectorul propriu $\boldsymbol{k}$. Tensorii cu o astfel de simetrie se numesc tensori *transversal-izotropi*.

Cînd toate cele trei valori proprii ale tensorului sînt diferite, alegem drept sistem vechi, sistemul de coordonate propriu al lui. În acest sistem, sînt diferite de zero numai trei componente

$$S_{11} = S_{(1)},\ S_{22} = S_{(2)} \text{ şi } S_{33} = S_{(3)}.$$

Evident, în noul sistem de coordonate, toate componentele tensorului vor rămîne neschimbate, dacă matricea transformărilor ortogonale este de forma

$$c_{i'k} = \begin{Vmatrix} \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{Vmatrix}. \tag{22.3}$$

Această condiţie este satisfăcută de cele opt matrice ale grupului *mmm*. Axa 2 a acestui grup este orientată după vectorii proprii ai tensorului **S**.

Simetria exterioară a tensorilor şi a vectorilor este ilustrată intuitiv în reprezentările lor grafice. Pentru reprezentarea grafică a tensorilor simetrici de rangul doi se utilizează suprafeţe caracteristice şi suprafeţe indicatoare. Suprafaţa indicatoare* a unui tensor **S** este dată de ecuaţia

$$r(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{n} \cdot \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{n} = S_{ij}\, n_i\, n_j, \tag{22.4}$$

care înseamnă că, de la originea axelor de coordonate se dispun în fiecare direcţie $\boldsymbol{n}$ segmente egale numeric cu componenta normală a tensorului **S** în direcţia respectivă; vîrfurile acestor seg-

---

* Suprafaţa caracteristică mai este numită caracteristică, iar pentru suprafaţa indicatoare se utilizează noţiunea simplă de suprafaţă.

mente constituie tocmai suprafața unui tensor. Deoarece deja cele șase componente normale ale tensorului simetric de rangul doi, alese în mod corespunzător, îl definesc complet, este evident că folosind suprafața tensorului, cu atît mai mult, se poate reconstitui întregul tensor.

Exprimînd componentele vectorului unitar $\boldsymbol{n}$ în coordonate sferice (fig. 22.1)

$$n_1 = \sin\theta\cos\varphi,\ n_2 = \sin\theta\sin\varphi,\ n_3 = \cos\theta, \tag{22.5}$$

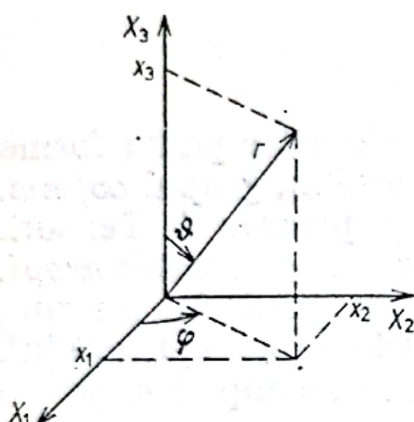


Fig. 22.1. Legătura dintre coordonatele sferice (r, θ, φ) și coordonatele carteziene (x_1, x_2, x_3).

vom obține ecuația suprafeței în aceste coordonate. Cea mai simplă formă o va avea aceasta dacă versorii de la care se consideră unghiurile θ și φ, se suprapun cu vectorii proprii ai tensorului. Dacă toate valorile proprii ale tensorului sînt diferite, atunci

$$r = (S_{(1)}\cos^2\varphi + S_{(2)}\sin^2\varphi)\sin^2\theta + S_{(3)}\cos^2\theta. \tag{22.6}$$

Dacă două valori proprii ale lui coincid, atunci

$$r = S_{\perp} + (S_{\parallel} - S_{\perp})\cos^2\theta\,; \tag{22.7}$$

faptul că r nu depinde de unghiul φ înseamnă că acesta este o suprafață de rotație a cărei axă coincide cu vectorul propriu. În sfîrșit, pentru tensorul $\mathbf{S} = S\mathbf{I}$ suprafața este sfera $r = S$.

Dacă toate valorile proprii ale tensorului $\mathbf{S}$ sînt pozitive, atunci distanța r, de la originea sistemului de coordonate a oricărui punct al suprafeței este tot pozitivă. Dacă însă printre valorile proprii se întîlnesc valori negative, atunci, pentru unele dintre direcții, r va fi, de asemenea, negativ. Dat fiind că distanța dintre două puncte este o mărime nenegativă, rezultă că menținîndu-se în cadrul geometriei obișnuite, suprafața corespunzătoare este imposibil de construit. A. V. Șubnikov a propus ca, în acest caz, porțiunile suprafeței corespunzătoare valorilor negative ale lui r să fie construite la fel ca și porțiunile pozitive obișnuite ale

suprafeței, însă cele negative să fie colorate în negru, spre deosebire de cele pozitive, care rămîn albe.

În figura 22.2 sînt reprezentate diferite tipuri de suprafețe ale tensorilor de rangul doi. Simetria acestor suprafețe coincide cu simetria exterioară a tensorilor pe care îi reprezintă.

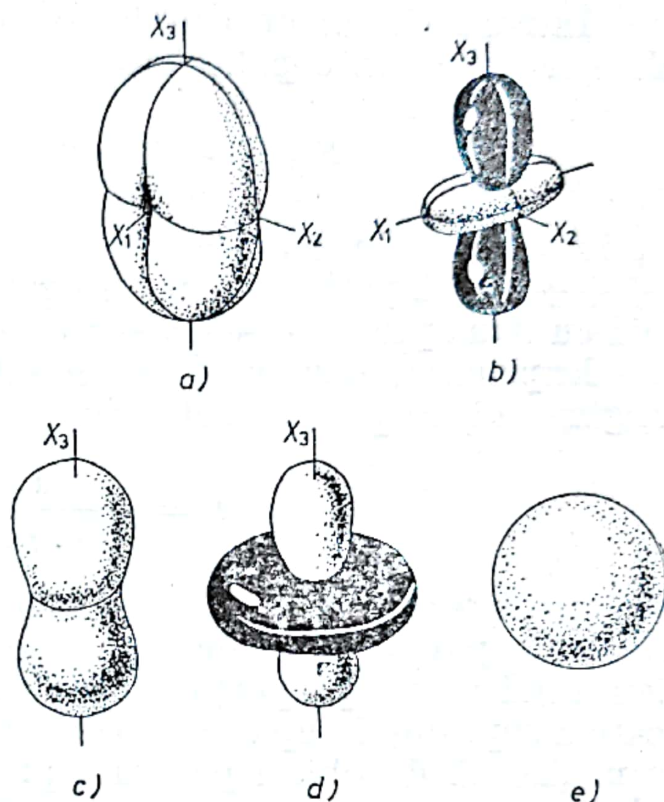


Fig. 22.2. Suprafețele tensorilor simetrici de rangul doi, **S**. Tensorii simetrici *mmm*: *a*) pentru $S_{(3)} > S_{(2)} > S_{(1)}$, *b*) pentru $S_{(1)} > S_{(2)} > S_{(3)}$. Tensorii simetriei ∞/mm; *c*) pentru $S_{\|} > S_{\perp} > 0$, *d*) pentru $S_{\|} > 0 > S_{\perp}$. Tensorul simetrici $\infty/\infty\, m$, $S > 0$. Axele de coordonate sînt orientate după vectorii proprii.

Suprafața poate fi construită și pentru un vector. Componenta normală a unui vector $\boldsymbol{v}$ după direcția vectorului unitar $\boldsymbol{n}$ este normal să denumim numărul $\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{n}$. Suprafața vectorului $\boldsymbol{v}$ se va defini prin ecuația

$$r(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{n} = v_i\, n_i \tag{22.8}$$

dacă se suprapune direcția pozitivă a axei X_3 de la care se măsoară unghiul θ, cu vectorul $\boldsymbol{v}$, (22.8) capătă forma

$$r = v \cos\,\theta. \tag{22.9}$$

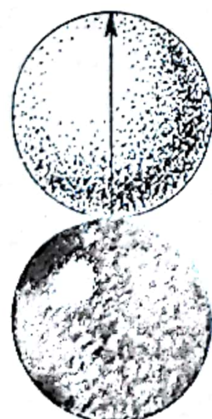


Fig. 22.3. Suprafața unui vector: grupul de simetrie al suprafeței este ∞m, iar grupul de antisimetrie, (v. §68) $\infty/m'm$.

Această suprafață reprezintă două sfere tangente — una albă și una neagră (fig. 22.3), diametrul fiecăruia dintre ele fiind egal cu v. Grupul de simetrie al acestei figuri, ∞m, coincide, cum și era de așteptat, cu grupul de simetrie exterioară al vectorului.

Pentru reprezentarea unui tensor simetric de rangul doi, S, se folosește și *suprafața caracteristică**. Ecuația ei este

$$\boldsymbol{r}\cdot\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{r} = 1, \qquad S_{ij}\, x_i\, x_j = 1. \tag{22.10}$$

Într-un sistem de coordonate construit pe axele principale ale tensorului, ea capătă forma

$$S_{(1)}\, x_1^2 + S_{(2)}\, x_2^2 + S_{(3)}\, x_3^2 = 1 \tag{22.11}$$

și, în funcție de semnele valorilor proprii, descrie un elipsoid $(+++)$, un hiperboloid cu o singură pînză $(++-)$, un hiperboloid cu două pînze $(+--)$ sau un elipsoid imaginar $(---)$.

Exprimînd raza vectoare $\boldsymbol{r}$ sub forma $\boldsymbol{r} = r\boldsymbol{p}$, unde r este lungimea ei, iar $\boldsymbol{p}$, un vector unitar, găsim din ecuația (22.10) că

$$r = \frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{p}\cdot\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{p}}}. \tag{22.12}$$

Prin urmare, caracteristica se află în acele conuri în care sînt conținute părțile albe ale suprafeței, raza vectoare a caracteristicii fiind invers proporțională cu rădăcina pătrată din raza vectoare a suprafeței după aceeași direcție. În practică, caracteristicile se utilizează de obicei pentru reprezentarea tensorilor ale căror valori proprii sînt, toate, pozitive. Cel mai frecvent, ele se utilizează în optica cristalelor: indicatricea optică, elipsoidul lui Fresnel (v. § 35 și § 36).

Fiecare tensor simetric de rangul doi are *planuri izotrope*; secțiunile centrale date de caracteristica și suprafața tensorilor cu aceste planuri se numesc *axe de izotropie*. Evident, pentru un tensor izotrop orice secțiune centrală reprezintă un plan izotropic și orice direcție este o axă de izotropie. În cazul unui tensor transversal-izotrop planul izotropic este reprezentat de planul vectorilor proprii. Deoarece în cazul unui tensor transversal-izotrop există numai o singură axă de izotropie, el se mai numește și tensor *uniax* (F. I. Fiodorov, 1958, 1965).

Tensorul cu cele trei valori proprii diferite are două axe de izotropie; aceasta rezultă din faptul că pentru o suprafață de ordinul doi,

$$S_{(1)}\, x_1^2 + S_{(2)}\, x_2^2 + S_{(3)}\, x_3^2 = 1,$$

unde

$$S_{(1)} \neq S_{(2)} \neq S_{(3)},$$

* Vezi nota de la pagina 187.

există două secțiuni circulare. De aceea, astfel de tensori se numesc tensori biași (F. I. Fiodorov, 1958, 1965). Într-adevăr, din orice pereche de vectori unitari, $\boldsymbol{c}'$ și $\boldsymbol{c}''$, se pot constitui tensorii

$$\mathbf{S} = a\mathbf{I} + b(\mathbf{c}'\mathbf{c}'' + \mathbf{c}''\mathbf{c}'), \quad S_{ij} = a\delta_{ij} + b(c_i' c_j'' + c_i'' c_j'). \tag{22.13}$$

Toate componentele normale ale tensorului $\mathbf{S}$ în direcțiile perpendiculare pe oricare dintre vectorii $\boldsymbol{c}'$ și $\boldsymbol{c}''$ sînt egale între ele: atît pentru $\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{c}' = 0$ cît și pentru $\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{c}'' = 0$

$$\boldsymbol{n} \cdot \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{n} = a\boldsymbol{n} \cdot \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{n} + b(\boldsymbol{n} \cdot \mathbf{c}'\mathbf{c}'' \cdot \boldsymbol{n} + \boldsymbol{n} \cdot \mathbf{c}''\mathbf{c}' \cdot \boldsymbol{n}) = a.$$

Aceasta înseamnă că planurile perpendiculare pe vectorii $\boldsymbol{c}'$ și $\boldsymbol{c}''$ sînt planuri izotrope, vectorii înșiși fiind orientați după axele de izotropie $\boldsymbol{c}'$ și $\boldsymbol{c}''$. Se poate ușor verifica faptul că vectorii proprii (nenormați) și valorile proprii ale tensorului $\mathbf{S}$, care le corespund, sînt egale respectiv cu

$$\begin{aligned} \boldsymbol{u}^{(1)} &= \mathbf{c}' - \mathbf{c}'', & S_{(1)} &= a - b(1 - \mathbf{c}'.\mathbf{c}''); \\ \boldsymbol{u}^{(2)} &= \mathbf{c}' \times \mathbf{c}'', & S_{(2)} &= a; \\ \boldsymbol{u}^{(3)} &= \mathbf{c}' + \mathbf{c}'', & S_{(3)} &= a + b(1 + \mathbf{c}'.\mathbf{c}''). \end{aligned} \tag{22.14}$$

Astfel, un vector propriu, care corespunde valorii proprii medie ca mărime, este perpendicular pe planul axelor de izotropie (adică orientat după linia de intersecție a planurilor de izotropie), ceilalți doi vectori proprii sînt orientați după bisectoarele unghiurilor dintre axele de izotropie. Vectorii unitari ai axelor de izotropie se pot exprima prin vectorii proprii unitari $\boldsymbol{u}^{(i)}$ și prin valorile proprii $S_{(1)} < S_{(2)} < S_3$ ale tesorului $\mathbf{S}$

$$\mathbf{c}' = k_1 \boldsymbol{u}^{(1)} + k_3 \boldsymbol{u}^{(3)}, \qquad \mathbf{c}'' = -k_1 \boldsymbol{u}^{(1)} + k_3 \boldsymbol{u}^{(3)},$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{S_{(3)} - S_{(2)}}{S_{(3)} - S_{(1)}}}, \quad k_3 = \sqrt{\frac{S_{(2)} - S_{(1)}}{S_{(3)} - S_{(1)}}}. \tag{22.15}$$

Axele de izotropie ale caracteristicilor, care se utilizează în fizica cristalelor — indicatricele optice și elipsoidul lui Fresnel — se numesc *axe optice*, de specia întîi și, respectiv, doi, sau *binormale* și *biradiale* (v. § 35, §36). În general, reprezentarea tensorilor sub forma (22.13) se aplică în special în fizica cristalelor (F. I. Fiodorov, 1958).

§ 23. VECTORI AXIALI

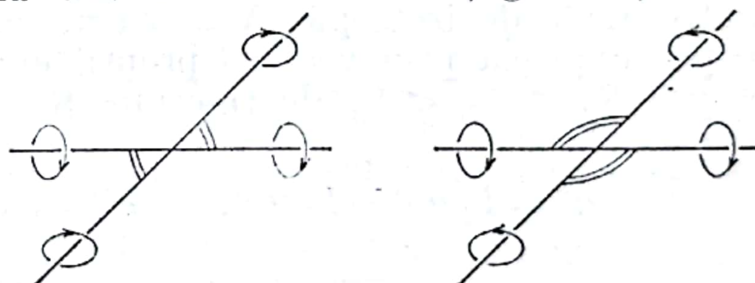
Alături de vectorii cu ajutorul cărora se exprimă deplasarea, viteza, accelerația, forța și alte mărimi care se reprezintă foarte just printr-o săgeată, în fizică se utilizează și vectori de un complet alt tip, care exprimă rotația, viteza unghiulară, accelerația unghiulară, momentul forței, intensitatea și inducția cîmpului magnetic. Ei caracterizează o rotație în jurul unei anumite axe, fiind normal să-i prezentăm printr-un segment de dreaptă, orientat paralel cu axa, indicînd, în același timp, sensul de rotație în jurul axei (fig. 23.1). Astfel de vectori se numesc *vectori axiali*, pe cînd vectorii obișnuiți, pentru a sublinia diferența lor față de cei axiali, se mai numesc uneori *vectori polari*.



Fig. 23.1. Un vector polar (*a*) și un vector axial (*b*).

Vectorii axiali se deosebesc de cei polari prin grupul de simetrie. Grupul de simetrie al unui vector axial este ∞/m. Spre deosebire de grupul de simetrie al unui vector polar, ∞m, grupul de simetrie al unui vector axial este centrosimetric (are un centru de simetrie): un vector axial este invariant la inversie (precum și față de reflexia pe orice plan perpendicular pe el).

Doi vectori axiali care se intersectează formează între ei două unghiuri suplimentare. Dacă un vector este rotit pînă se suprapune peste altul, atunci la rotirea cu unul dintre cele două unghiuri, după ce cei doi vectori se suprapun, sensurile de rotație coincid, iar prin rotirea cu celălalt unghi, sensurile de rotație vor fi contrare. Vom considera, prin urmare, că primul dintre aceste unghiuri reprezintă unghiul dintre vectorii axiali (fig. 23.2).


Fig. 23.2. Unghiul dintre doi vectori axiali.

Să examinăm algebra vectorilor axiali. Prin înmulțirea unui vector axial cu un număr pozitiv, λ, lungimea vectorului se mărește de λ ori, iar dacă λ este negativ, atunci sensul rotației se schimbă în sens invers față de cel inițial.

Suma a doi vectori axiali, $\mathring{\boldsymbol{a}}$ și $\mathring{\boldsymbol{b}}$, se definește analog cu suma a doi vectori polari. Și aici se poate aplica oricare dintre cele două reguli echivalente: regula paralelogramului sau regula triunghiului. În primul caz, pe vectorii $\mathring{\boldsymbol{a}}$ și $\mathring{\boldsymbol{b}}$ se construiește un paralelogram;

vectorul $\overset{\circ}{c} = \overset{\circ}{a} + \overset{\circ}{b}$ este acea diagonală a paralelogramului care secționează unghiul dintre vectorii $\overset{\circ}{a}$ și $\overset{\circ}{b}$, iar sensul rotației se alege astfel, încît după rotirea vectorului $\overset{\circ}{c}$ în interiorul unghiului dintre vectorii $\overset{\circ}{a}$ și $\overset{\circ}{b}$ astfel încît să se suprapună cu unul dintre vectorii inițiali, sensurile de rotație în jurul axelor ce le reprezintă (pe care le vom numi circulație) să coincidă (fig. 23.3).

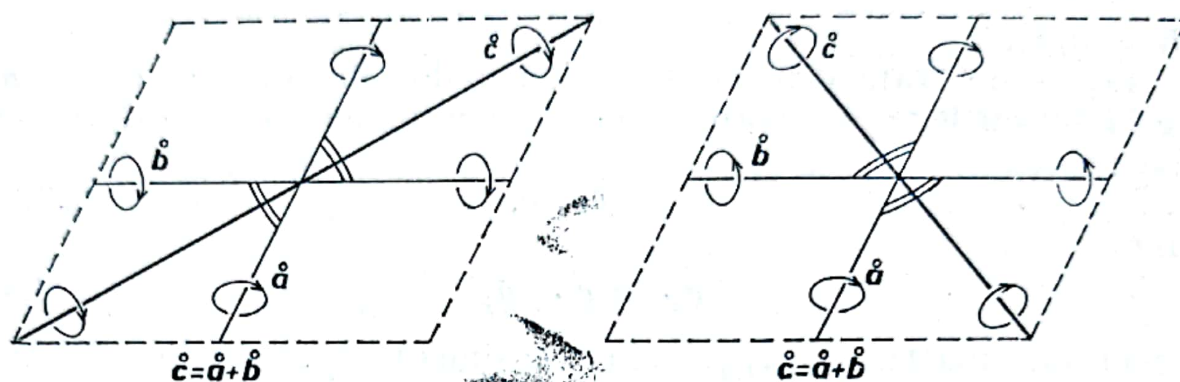


Fig. 23.3. Compunerea vectorilor axiali; regula paralelogramului.

La compunerea a doi vectori axiali, folosind regula triunghiului, vectorii $\overset{\circ}{a}$ și $\overset{\circ}{b}$ se așază unul la capătul celuilalt, astfel încît sensul circulațiilor să fie același de-a lungul întregii linii frînte astfel obținute. Unind capetele libere cu un segment și dîndu-i un sens de circulație contrar, obținem vectorul $\overset{\circ}{c} = \overset{\circ}{a} + \overset{\circ}{b}$. Ca și în cazul compunerii vectorilor polari, acest procedeu se generalizează ușor în regula liniei poligonale, care permite să se compună dintr-odată mai mulți vectori (fig. 23.4).

Produsul scalar a doi vectori axiali este egal cu produsul dintre lungimile vectorilor și cosinusul unghiului dintre ei: $\overset{\circ}{a} \cdot \overset{\circ}{b} = ab \cos \gamma$. Produsul scalar fiind astfel definit permite introducerea bazei ortonormate $\overset{\circ}{e}_1, \overset{\circ}{e}_2, \overset{\circ}{e}_3$, formată din vectori axiali ($\overset{\circ}{e}_i \cdot \overset{\circ}{e}_j = \delta_{ij}$).

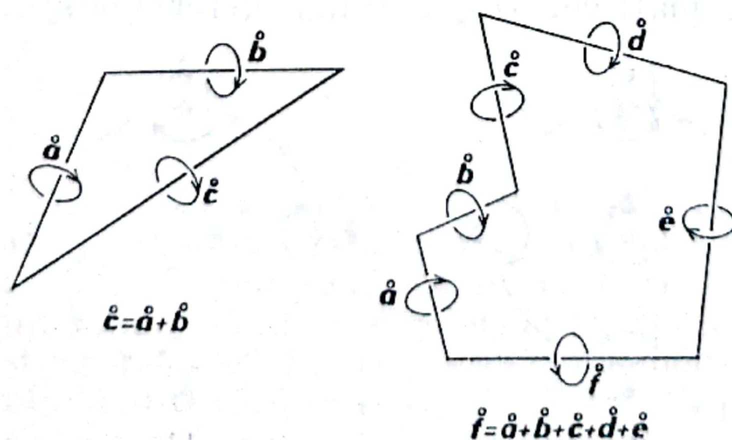


Fig. 23.4. Compunerea vectorilor axiali; regula triunghiului (a liniei poligonale).

Orice vector axial, $\mathring{\boldsymbol{a}}$, poate fi descompus în raport cu această bază

$$\mathring{\boldsymbol{a}} = \mathring{a}_i\, \mathring{\boldsymbol{e}}_i, \tag{23.1}$$

astfel încît

$$\mathring{a}_i = \mathring{\boldsymbol{a}} \cdot \mathring{\boldsymbol{e}}_i. \tag{23.2}$$

Este ușor de arătat că dacă $\mathring{\boldsymbol{c}} = \mathring{\boldsymbol{a}} + \mathring{\boldsymbol{b}}$, atunci $\mathring{c}_i = \mathring{a}_i + \mathring{b}_i$, și că $\mathring{\boldsymbol{a}} \cdot \mathring{\boldsymbol{b}} = \mathring{a}_i\, \mathring{b}_i$.

Legea de transformare a coeficienților descompunerii lui $\mathring{a}_i$ este la fel cu legea de transformare a componentelor unui vector polar: dacă

$$\mathring{\boldsymbol{e}}_{i'} = \mathring{c}_{i'k}\, \mathring{\boldsymbol{e}}_k, \tag{23.3}$$

atunci

$$\mathring{a}_{i'} = \mathring{c}_{i'k}\, \mathring{a}_k. \tag{23.4}$$

Elementele matricei $\|\mathring{c}_{i'k}\|$ sînt cosinușii unghiurilor dintre vectorii axiali fundamentali $\mathring{\boldsymbol{e}}_{i'}$ și $\mathring{\boldsymbol{e}}_k$. Deoarece o bază axială este invariantă față de o inversie, atunci fie că este supusă unei rotații proprii, $R(\mathring{\boldsymbol{k}}, \varphi)$ cu unghiul φ în jurul vectorului unitar, $\mathring{\boldsymbol{k}}$, fie unei rotații cu inversie, $\bar{1}R(\mathring{\boldsymbol{k}}, \varphi)$, rezultă că matricea $\|\mathring{c}_{i'k}\|$ oricum coincide cu matricea rotației proprii corespunzătore. Din această cauză pentru orice transformări ortogonale, $\det\| c_{i'k} \| = 1$.

Desigur, ne putem imagina și transformări ale bazei vectoriale axiale, cărora să le corespundă o matrice $\|\mathring{c}_{i'k}\|$ avînd determinantul -1. Așa este, de pildă, transformarea configurației *a* în configurația *b* din figura 23.5; ea este descrisă de matricea $\mathring{c}_{i'k} = -\delta_{i'k}$. Însă astfel de transformări nu mai sînt ortogonale; ele vor fi examinate în § 71. În cadrul grupului transformărilor ortogonale, bazele vectoriale axiale ortonormate se descompun însă în două clase. Două baze, care intră într-o clasă, se suprapun cu ajutorul a două transformări ortogonale: $R(\mathring{\boldsymbol{k}}, \varphi)$ și $\bar{1}R(\mathring{\boldsymbol{k}}, \varphi)$ cărora le corespunde una și aceeași matrice, $\|\mathring{c}_{i'k}\|$, avînd determinantul

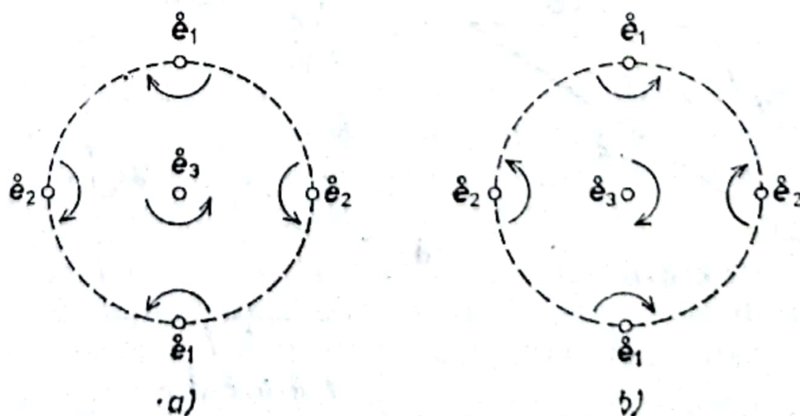


Fig. 23.5. Transformarea unei baze vectoriale axiale cu determinantul −1 (proiecție stereografică). Baza *b*) nu se poate obține din baza *a*) prin nici un fel de transformare ortogonală.

egal cu +1. Bazele care aparţin însă unor clase diferite nu se pot suprapune prin nici o transformare ortogonală, versorii lor formînd între ei unghiuri astfel încît det $\|\mathring{e}_{i'k}\| = -1$:

În majoritatea problemelor de fizică, vectorii axiali se utilizează împreună cu cei polari, fiind de dorit ca ambele tipuri de vectori să fie raportaţi la aceeaşi bază. Potrivită acestui scop este numai baza polară, pentru că ea, spre deosebire de cea axială, se modifică esenţial la fiecare transformare ortogonală.

Fie dată o bază vectorială polară ortonormată oarecare, $\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$. Să construim pe ea baza axială, $\mathring{\boldsymbol{e}}_1$, $\mathring{\boldsymbol{e}}_2$, $\mathring{\boldsymbol{e}}_3$, astfel încît $\mathring{\boldsymbol{e}}_1$ să coincidă cu $\boldsymbol{e}_1$, $\mathring{\boldsymbol{e}}_2$ să coincidă cu $\boldsymbol{e}_2$, $\mathring{\boldsymbol{e}}_3$, cu $\boldsymbol{e}_3$, iar sensul de circulaţie în jurul vectorilor axiali ai bazei îi vom defini după numărul de ordine al vectorilor polari: sensul circulaţiei în jurul lui $\mathring{\boldsymbol{e}}_1$ se alege de la capătul vectorului $\boldsymbol{e}_2$ către capătul vectorului $\boldsymbol{e}_3$, sensul circulaţiei în jurul lui $\mathring{\boldsymbol{e}}_2$, de la capătul lui $\boldsymbol{e}_3$ spre capătul lui $\boldsymbol{e}_1$, în jurul lui $\mathring{\boldsymbol{e}}_3$, de la capătul lui $\boldsymbol{e}_1$ către capătul lui $\boldsymbol{e}_2$ (fig. 23.6). Această definire a sensurilor circulaţiilor este invariantă: ea se conservă pentru orice transformări ortogonale; pentru verificare este suficient să se supună figura obţinută inversiunii (fig. 23.6). Remarcăm că în această definiţie, sensul circulaţiei în jurul axei $\mathring{\boldsymbol{e}}_1$ este legat de sensurile vectorilor $\boldsymbol{e}_2$ şi $\boldsymbol{e}_3$ şi nu de sensul vectorului $\boldsymbol{e}_1$.

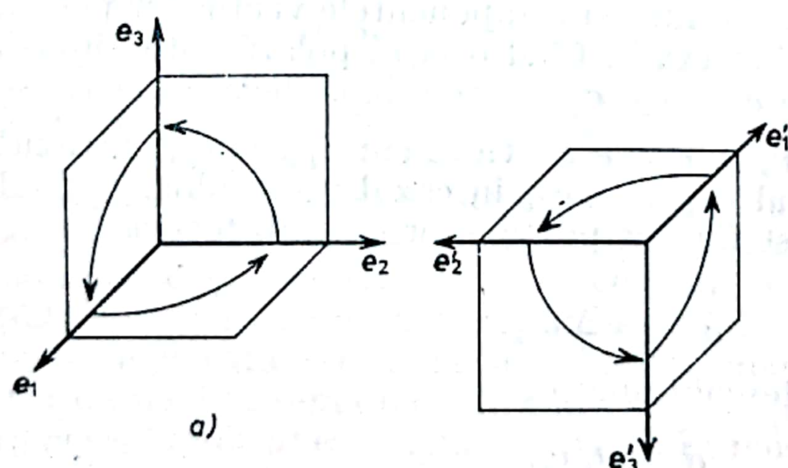


Fig. 23.6. Determinarea sensurilor de rotire în jurul vectorilor bazei (*a*) şi păstrarea lor în cadrul inversiei (*b*).

Legătura dintre sensul circulaţiei în jurul vectorului $\mathring{\boldsymbol{e}}_1$ şi sensul vectorului $\boldsymbol{e}_1$, dimpotrivă nu mai este invariantă faţă de rotirile cu inversie. Anume, vectorul polar formează împreună cu un vector axial care coincide cu el, fie un şurub drept, fie unul stîng (fig. 23.7). În cazul rotaţiilor proprii, şuruburile drepte rămîn drepte, iar cele stîngi, stîngi, pe cînd în cazul rotaţiilor cu inversie denumirile şuruburilor se schimbă în cele contrare.

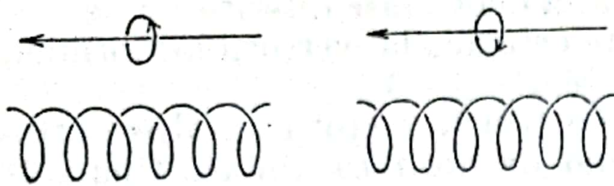


Fig. 23.7. Suprapunerea unui vector polar cu un vector axial : *a*) formează o elice dreaptă ; *b*) formează o elice stîngă

Pe de altă parte, și tripletul vectorilor unei baze polare poate fi drept și stîng (se numește drept, dacă vectorul $\boldsymbol{e}_1$ poate fi luat după degetul mare, $\boldsymbol{e}_2$, după degetul arătător, iar $\boldsymbol{e}_3$, după degetul mijlociu al mîinii drepte). În cazul rotațiilor proprii, tripletul drept rămîne drept, iar cel stîng rămîne stîng, pe cînd în cazul inversiilor tripletul drept se transformă în stîng, iar cel stîng în drept.

Cînd sensurile de circulație în jurul vectorilor axiali sînt definite după numărătoarea vectorilor polari cu care coincid, ambele baze sînt în concordanță : denumirea șuruburilor formate din perechi de vectori care se suprapun coincide cu denumirea tripletelor de vectori polari ; dacă, de exemplu $\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$ este un triplet drept, atunci șuruburile formate din vectorii $\boldsymbol{e}_1$ și $\mathring{\boldsymbol{e}}_1$, $\boldsymbol{e}_2$ și $\mathring{\boldsymbol{e}}_2$, $\boldsymbol{e}_3$ și $\mathring{\boldsymbol{e}}_3$ sînt tot drepte. Concordanța bazelor polare și axiale este invariantă față de orice transformări ortogonale.

Rezultă deci că unei baze polare date, îi corespunde o bază axială și numai una, legătura dintre ele rămînînd aceeași pentru toate transformările ortogonale (dimpotrivă, fiecărei baze axiale îi corespund două baze polare). Tocmai acest fapt permite să raportăm la baza polară, nu numai componentele vectorilor polari, ci și pe cele ale vectorilor axiali. Cînd o bază polară este supusă transformării ortogonale $\boldsymbol{e}_{i'} = c_{i'k}\, \boldsymbol{e}_k$, baza axială legată de ea se transformă după legea $\mathring{\boldsymbol{e}}_{i'} = \mathring{c}_{i'k}\; \mathring{\boldsymbol{e}}_k$, astfel încît $\mathring{c}_{i'k} = c_{i'k}$ în cazul rotațiilor proprii, pe cînd $\mathring{c}_{i'k} = -\, c_{i'k}$ în cazul inversiilor. Notînd cu $\Delta = \det \; \|c_{i'k}\|$, acest fapt se poate exprima sub forma

$$\mathring{c}_{i'k} = \Delta\, c_{i'k}. \tag{23.5}$$

Coeficienții a_i ai descompunerii,

$$\mathring{\boldsymbol{a}} = a_i\, \boldsymbol{e}_i, \tag{23.6}$$

a unui vector axial, $\mathring{\boldsymbol{a}}$, după o bază polară, sînt egali, conform definiției, cu coeficienții $\mathring{a}_i$ ai descompunerii acestora după baza axială legată de baza polară dată ; ei pot fi denumiți simplu componentele vectorului axial, $\mathring{\boldsymbol{a}}$. Legea lor de transformare se deduce din compararea formulelor (23.4) și (23.5)

$$a_{i'} = \Delta c_{i'k}\, a_k. \tag{23.7}$$

Din relaţia (23.6) rezultă că componentele vectorului axial

$$a_i = \mathring{\boldsymbol{a}} \cdot \boldsymbol{e}_i \tag{23.8}$$

sînt produsele scalare dintre vectorul axial şi cel polar.

În cazul general, produsul scalar dintre un vector axial, $\mathring{\boldsymbol{a}} = a_k\, \boldsymbol{e}_k$, şi unul polar, $\boldsymbol{p} = p_l\, \boldsymbol{e}_l$, este egal cu

$$\mathring{\boldsymbol{a}} \cdot \boldsymbol{p} = (a_k\, \boldsymbol{e}_k) \cdot (p_l\, \boldsymbol{e}_l) = a_k\, p_k. \tag{23.9}$$

Legea lui de transformare rezultă din legile de transformare a componentelor vectorului axial, (23.7), şi a celui polar, (18.1),

$$a_{i'}\ p_{i'} = \Delta c_{i'k}\, a_k\, c_{i'l}\, p_l = \Delta \delta_{kl}\, a_k\, p_l = \Delta a_k\, p_k \tag{23.10}$$

(aici s-a aplicat formula (17.4)). Prin urmare, acest produs scalar este invariant faţă de rotaţiile proprii ale sistemului de coordonate, dar se înmulţeşte cu -1, în cazul rotaţiilor cu inversie. Astfel de mărimi se numesc *mărimi pseudoscalare*; legea de transformare a lor are forma

$$\psi' = \Delta\psi, \tag{23.11}$$

unde ψ este componenta pseudoscalarului în vechiul sistem de coordonate, ψ', în noul sistem, iar Δ, determinantul matricei transformării ortogonale, care transpune sistemul vechi în sistemul nou.

Ca exemplu de pseudoscalar poate fi considerată rotaţia specifică a planului de polarizare a substanţelor izotrope sau optic izotrope, care rotesc planul de polarizare (soluţia apoasă de zahăr, cristalele cubice $NaClO_3$ şi $NaBrO_3$ şi altele). Această mărime se consideră pozitivă, dacă sensul de rotaţie a planului de polarizare este dat de un şurub de acelaşi nume ca şurubul sistemului de coordonate şi negativă, în caz contrar (vezi § 81). Deoarece în cazul rotaţiei cu inversie a unui sistem de coordonate, felul şurubului ce îl caracterizează se schimbă, mărimea rotaţiei specifice faţă de noul sistem de coordonate şi aceeaşi mărime faţă de sistemul vechi vor avea semne contrare. În mod obişnuit, rotaţia specifică se raportează la un sistem de coordonate drept.

Produsul scalar dintre un vector axial şi unul polar poate fi definit şi pur geometric (fig. 23.8): el este egal cu produsul dintre mărimile vectorilor şi cosinusul unghiului dintre ele; dintre cele două unghiuri posibile (care sînt suplimentare între ele), se ia acela, care prin rotaţia unuia dintre vectori cu acest unghi pentru a-l aduce în coincidenţă cu al doilea, se obţine un şurub de acelaşi fel cu cel corespunzător bazei (sau sistemului de coordonate construit pe el). Astfel, produsul scalar dintre un vector

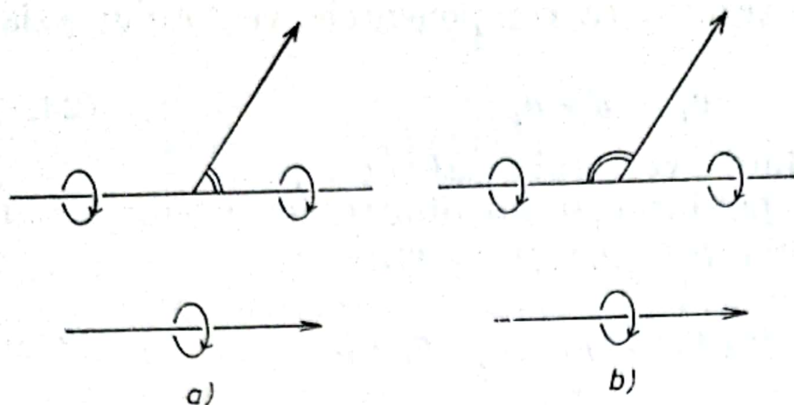


Fig. 23.8. Definirea unghiului dintre un vector polar și unul axial: *a*) cînd unghiul dintre vectorul polar și cel axial se ia într-un sistem de coordonate drept; *b*) unghiul dintre aceiași vectori, într-un sistem de coordonate stîng.

polar și unul axial are sens numai în cazul în care este definit un anumit sistem de coordonate, mai exact, în cazul în care se dă tipul sistemului de coordonate (drept sau stîng).

Să trecem la examinarea produselor vectoriale. Prin definiție, produsul vectorial a doi vectori polari, $\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{q}$, este vectorul axial cu lungimea $pq\sin\alpha$, perpendicular pe ambii factori, al cărui sens de circulație coincide cu sensul rotației care aduce primul factor peste al doilea (fig. 23.9 *a*).

Produsul vectorial a doi vectori axiali se definește exact la fel (fig. 23.9, *b*).

Produsul vectorial dintre un vector axial și unul polar, $\mathring{\boldsymbol{a}} \times \boldsymbol{p}$, este vectorul polar de lungime $ap\sin\alpha$, perpendicular pe

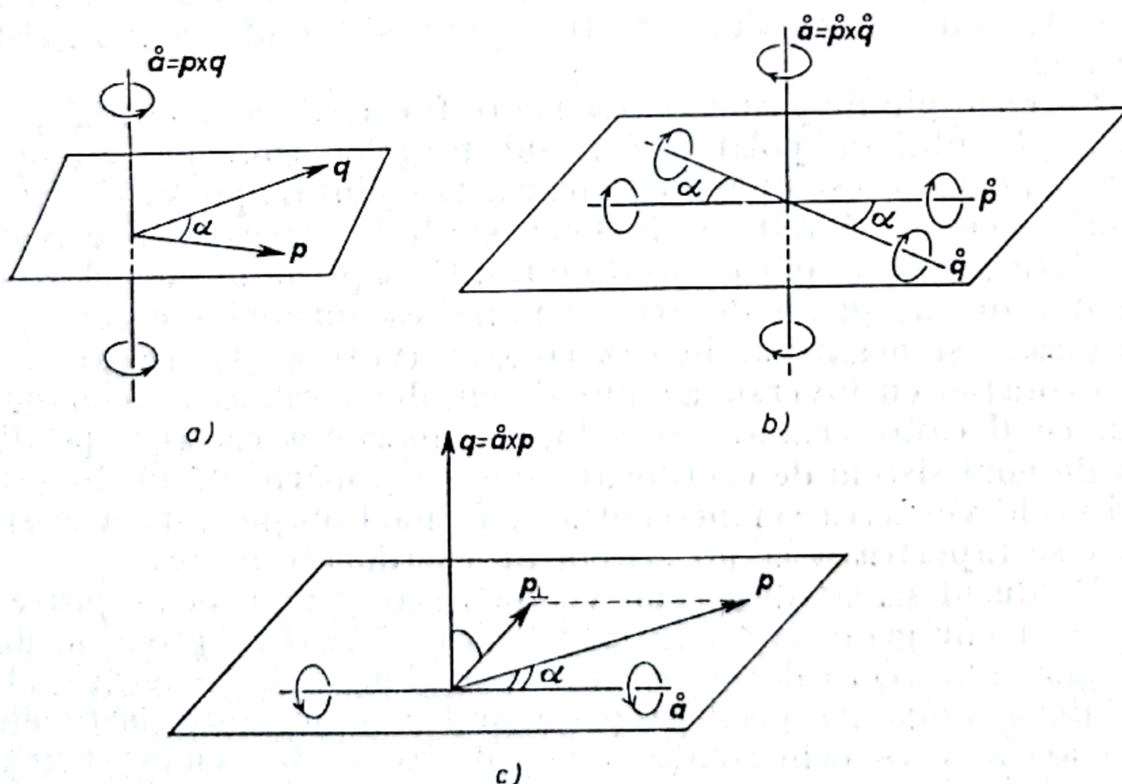


Fig. 23.9. Înmulțirea vectorilor: *a*) a doi vectori polari; *b*) a doi vectori axiali; *c*) a unui vector axial cu unul polar.

ambii factori și orientat în sensul în care s-ar orienta componenta $\boldsymbol{p}_\perp$ a vectorului $\boldsymbol{p}$, perpendiculară pe $\mathring{\boldsymbol{a}}$, după o rotație cu $\pi/2$ în jurul vectorului $\mathring{\boldsymbol{a}}$ în sensul de rotație al acestuia (fig. 23.9,c). În acest caz, o anumită indeterminare a unghiului dintre vectorul polar și cel axial nu are însemnătate, deoarece $\sin(\pi - \alpha) = \sin\alpha$. În cazul permutării factorilor sensul acestui produs vectorial, așa cum s-a arătat mai înainte, se schimbă în cel contrar.

Pentru scrierea componentelor tuturor acestor produse vectoriale este posibilă o formă unică: fie $\boldsymbol{c} = \boldsymbol{b} \times \boldsymbol{d}$, în care fiecare dintre vectorii $\boldsymbol{b}$ și $\boldsymbol{d}$ poate fi considerat atît ca vector polar cît și ca axial, iar tipul vectorului $\boldsymbol{c}$ este definit de tipul vectorilor factori. Atunci

$$c_i = \delta_{ijk}\, b_j\, d_k. \qquad (23.12)$$

Această formă este valabilă și pentru scrierea operației diferențiale rot. După cum se știe, o funcție vectorială de coordonate, $\boldsymbol{u} = \mathrm{rot}\ \boldsymbol{v}$, poate fi reprezentată sub forma $\boldsymbol{u} = \nabla \times \boldsymbol{v}$, în care vectorul simbolic ∇ este $\nabla = \boldsymbol{e}_i \dfrac{\partial}{\partial x_i}$. Deci componentele vectorului $\boldsymbol{u} = \mathrm{rot}\ \boldsymbol{v}$ vor fi

$$u_i = \delta_{ijk} \frac{\partial v_k}{\partial x_j}. \qquad (23.13)$$

Bazele calculului tensorial sînt expuse în multe manuale, de exemplu Akivis și Goldberg (1969); Borisenko și Tarapov (1966); Vakulenko (1972); Mac Connel (1963); Rașevski (1964); Shouten (1965). În afară de aceasta, în unele monografii și manuale de mecanică a mediilor continue și de fizică a cristalelor există secțiuni consacrate calculului tensorial: Lure (1970); Nye (1967); Sedov (1962); F. I. Fiodorov (1965).

CAPITOLUL 3

INTRODUCERE ÎN FIZICA CRISTALELOR. PROPRIETĂȚILE ELECTRICE ȘI PROPRIETĂȚILE TERMICE ALE CRISTALELOR

§ 24. MEDIILE CONTINUE ANIZOTROPE

Noțiunea inițială fundamentală a oricărei teorii a unui mediu continuu este *volumul elementar*, adică partea separată mintal din materialul studiat, ale cărei dimensiuni satisfac două necesități :

1) trebuie să includă atît de multe unități structurale (în cazul unui cristal — celule elementare, în cazul unei sticle plastice — fibre individuale de sticlă etc.), încît să poată fi considerată cu suficientă exactitate omogenă ;

2) este atît de mică, încît se poate neglija variația cîmpurilor fizice pe toată întinderea ei : în limitele unui singur volum elementar, cîmpurile fizice (electric, magnetic, cîmpul tensiunilor mecanice ș.a.) se consideră omogene. Notînd constanta rețelei cu a, dimensiunea caracteristică a volumului elementar este $\sqrt[3]{v}$, iar gradientul cîmpului, $\partial E/\partial x$ (pentru a fixa ideile se consideră cîmpul electric), ambele condiții pot fi scrise sub formă de inegalitate

$$a \ll \sqrt[3]{v} \ll \frac{E}{\partial E/\partial x}. \tag{24.1}$$

Dacă cîmpul este periodic în spațiu și se caracterizează printr-o lungime de undă λ, atunci (24.1) capătă forma

$$a \ll \sqrt[3]{v} \ll \lambda. \tag{24.2}$$

Din faptul că un mediu continuu este omogen în limitele unei celule elementare, nu rezultă încă și faptul că el este omogen în întregime, adică nu rezultă că proprietățile tuturor volumelor elementare sînt identice. De aici rezultă numai că proprietățile unor volume elementare vecine sînt la fel. Luînd drept exemplu permitivitatea, $\varkappa$, se poate scrie, pentru orice mediu continuu, inegalitatea

$$a \ll \sqrt[3]{v} \ll \frac{\varkappa}{\partial\varkappa/\partial x},$$

sau

$$\frac{\partial \varkappa}{\partial x} \ll \frac{\varkappa}{a},$$

pe cînd, într-un mediu omogen,

$$\frac{\partial \varkappa}{\partial x} \equiv 0.$$

Studiind acţiunea cîmpurilor fizice asupra unui cristal, cîmpuri a căror lungime de undă este mult mai mare decît dimensiunile unui celule elementare, putem face abstracţie de structura microscopică a cristalului, adică să ni-l imaginăm ca pe un mediu continuu, dat. Dimpotrivă, în efectele interacţiunii substanţei cristaline cu cîmpuri de lungimi de undă comparabile cu dimensiunile unei celule elementare, se manifestă structura discretă a cristalului, ceea ce permite tocmai utilizarea acestor efecte în studiul structurii cristalului.

Aici cristalele sînt examinate ca medii continue anizotrope omogene. Un *mediu anizotrop omogen* este acel mediu ale cărui proprietăţi nu depind de coordonatele carteziene, în ciuda faptului că depind de o direcţie. În acest caz, se consideră direcţii identice direcţiile paralele, iar planuri identice, planurile paralele.

Uneori astfel de medii se numesc medii *rectiliniu-anizotrope*, spre deosebire de *mediile curbiliniu-anizotrope* — de exemplu, mediile cilindric-anizotrope sau sferic-anizotrope. Noi vom considera însă omogene numai mediile rectiliniu-anizotrope. Ar fi de dorit ca definirea omogenităţii să fie invariantă, adică materialul s-ar considera omogen sau neomogen independent de sistemul de coordonate în care este el studiat. Iar pentru aceasta, este necesară condiţia anulării nu a derivatelor parţiale ci a derivatelor covariante în raport cu coordonatele tensorilor care caracterizează proprietăţile unui material. Întrucît pentru anularea derivatelor covariante în raport cu orice coordonate curbilinii, este necesară şi suficientă anularea derivatelor parţiale n raport cu coordonatele carteziene, sînt într-adevăr omogene numai materialele ectiliniu-anizotrope.

Anizotropia proprietăţilor fizice ale cristalului se stabileşte pe calea măsurării acestor proprietăţi pe mostre cristaline orientate diferit. Astfel, anizotropia dilatării termice a cristalelor se poate elucida măsurînd variaţiile relative ale grosimii, $\Delta a/a$, pentru lamele cristaline orientate diferit, la o încălzire a lor cu Θ grade. *Coeficientul de dilatare termică* al unei lamele, a cărei orientare este dată de indicii Miller (hkl), este

$$\alpha_{(hkl)} = \frac{(\Delta a/a)_{(hkl)}}{\Theta}$$

Analog, anizotropia modulului lui Young se poate studia prin măsurarea alungirilor relative, $\Delta l/l$, a unor bare cristaline orientate diferit, sub acțiunea unui efort unitar de întindere, σ: pentru bara $[uvw]$ *modulul lui Young* este

$$E_{[uvw]} = \frac{\sigma}{(\Delta l/l)_{[uvw]}}.$$

Proprietățile elastice ale materialelor sînt caracterizate nu numai cu ajutorul modulului Young, ci și cu ajutorul modulului de torsiune a cilindrului, G. Măsurînd unghiurile de torsiune relative, φ/l, ale unor bare cristaline rotunde, orientate diferit, sub acțiunea momentului de torsiune K, obținem pentru bara $[uvw]$ *modulul de torsiune*

$$G_{[uvw]} = \frac{K/J}{(\varphi/l)_{[uvw]}},$$

unde J este momentul polar de inerție al secțiunii transversale a barei. Adesea se utilizează mărimile inverse: E^{-1} și G^{-1}; ele se numesc *coeficientul de întindere* și *coeficientul de torsiune* (aceste noțiuni vor fi examinate mai amănunțit în capitolul 6: coeficientul de dilatare termică, în §§ 51 și 52, modulul Young, în § 53, iar modulul de torsiune al cilindrului, în § 54).

Orientarea barelor cristaline și a lamelelor cristaline poate fi dată și cu ajutorul vectorului unitar, $\boldsymbol{n}$, luat după axa barei sau după normala lamelei (relativ la legătura dintre componentele sale și indicii Miller vezi § 16). Componentele n_i ale vectorului $\boldsymbol{n}$, pot fi exprimate, la rîndul lor, cu ajutorul formulelor (22.5) în funcție de coordonatele sferice — unghiurile θ și φ (vezi, de asemenea, figura 22.1). Drept urmare, coeficientul de dilatare termică, modulul Young și modulul de torsiune al cilindrului sînt exprimate sub forma unor funcții de vectorii unitari, $\alpha(\boldsymbol{n})$, $E(\boldsymbol{n})$, $G(\boldsymbol{n})$, sau de coordonatele sferice $\alpha(\theta, \varphi)$, $E(\theta, \varphi)$, $G(\theta, \varphi)$.

Dacă dintr-un punct oarecare O — originea sistemului de coordonate sferice — se duc toate razele posibile, definite prin unghiurile θ și φ, și se iau pe ele, la o anumită scară, mărimile $\alpha(\theta,\varphi)$ sau $E(\theta, \varphi)$, se obțin suprafețele coeficientului de dilatare și modulului Young; modele de astfel de suprafețe, pentru unele cristale, sînt reprezentate în figurile 24.1, *a*, 24.2, *a*, 24.4, 24.5, 24.7, 24.8 *a*, 24.9. Modele de suprafețe, chiar dacă sînt foarte intuitive, sînt și greu de realizat și puțin utile în evaluările cantitative. Din acest punct de vedere, ceva mai comode sînt *secțiunile suprafețelor* (vezi figurile 24.5, 24.8, *b*, 24.10). Însă și ele permit

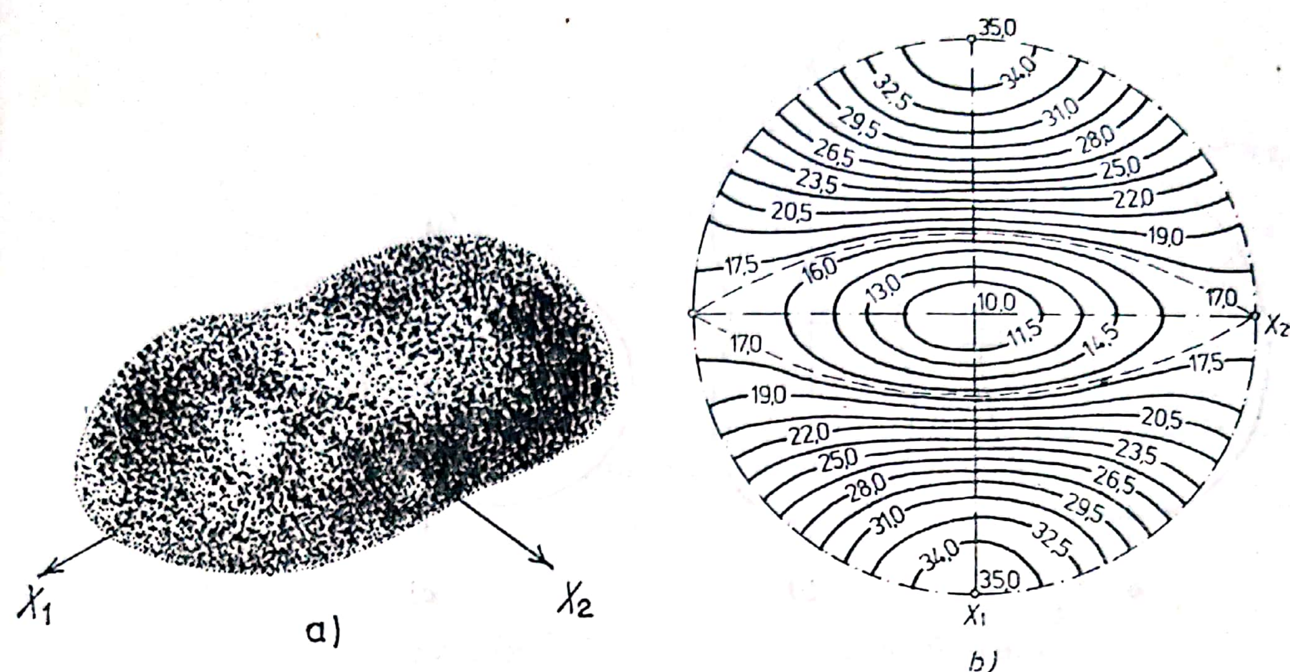


Fig. 24.1. a) Modelul jumătății superioare a suprafeței coeficientului de dilatare termică a aragonitului, clasa *mmm* ; *b*) proiecția ei stereografică, în 10^{-6} grad^{-1}. Jumătatea inferioară este reflectarea de oglindire a celei superioare (Butabaev și Sirotin, 1973)

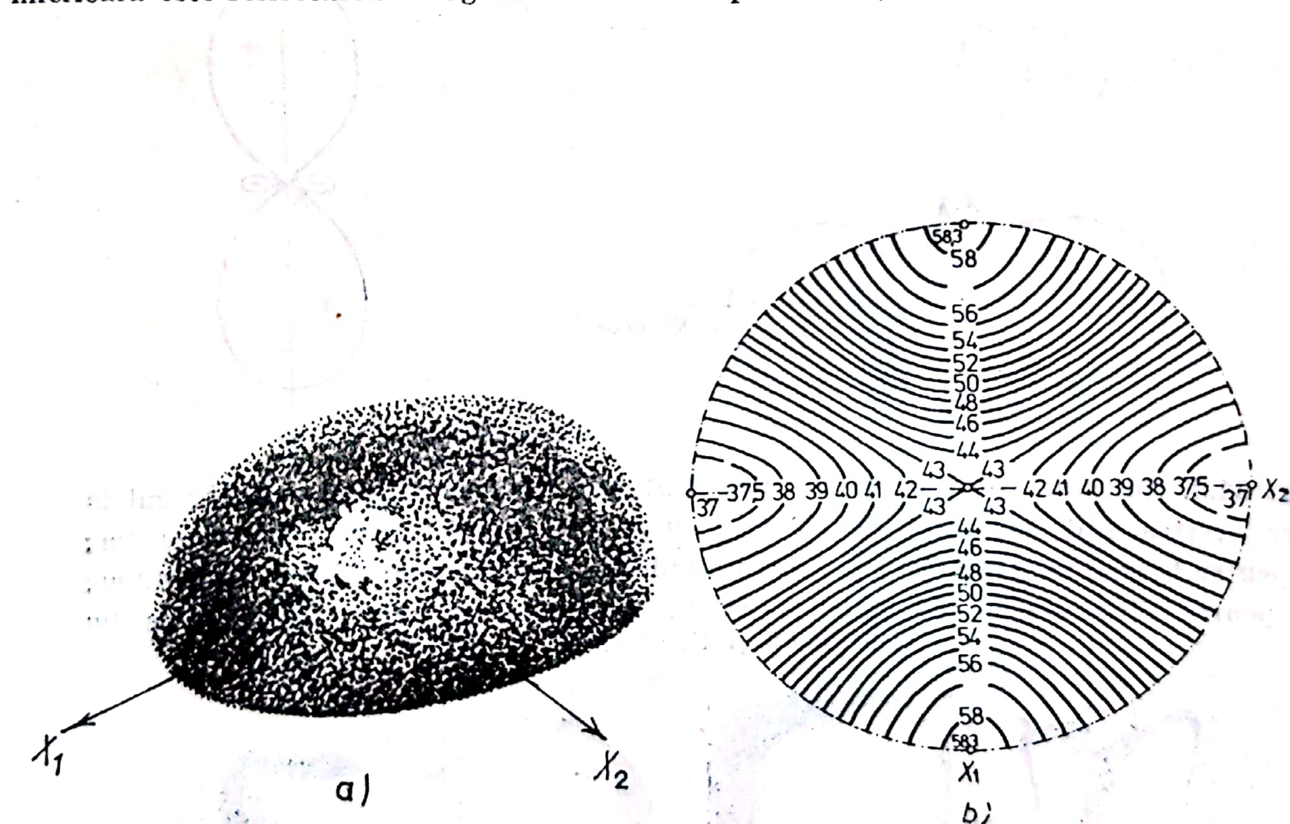


Fig. 24.2. Modelul jumătății superioare (cea inferioară este reflexia de oglindire a jumătății superioare) a suprafeței coeficientului de dilatare termică pentru cristalul de sare Seignette, clasa 222 (*a*) și proiecția ei stereografică, în 10^{-6} grad^{-1} (*b*). Deosebirile de formă dintre proiecțiile stereografice din figurile 24.1 și 24.2 se explică prin faptul că la aragonit centrului proiecției (axa X_3) îi corespunde valoarea extremă a funcției, pe cînd la sarea Seignette — punctul de inflexiune al acestei funcții.

Fig. 24.3. Secţiuni ale suprafeţelor coeficientului de dilatare termică, în cazul în care acestea sînt suprafeţe de rotaţie: *a*) pentru un cristal de safir, clasa $\bar{3}m$; *b*) pentru turmalină, clasa $3m$; *c*) pentru dihidrofosfat de potasiu (KDP), clasa $\bar{4}2\ m$; *d*) pentru dihidrofosfat de amoniu (ADP), clasa $\bar{4}2m$; pentru calcit, clasa $\bar{3}m$ (Butabaev şi Sirotin, 1972).

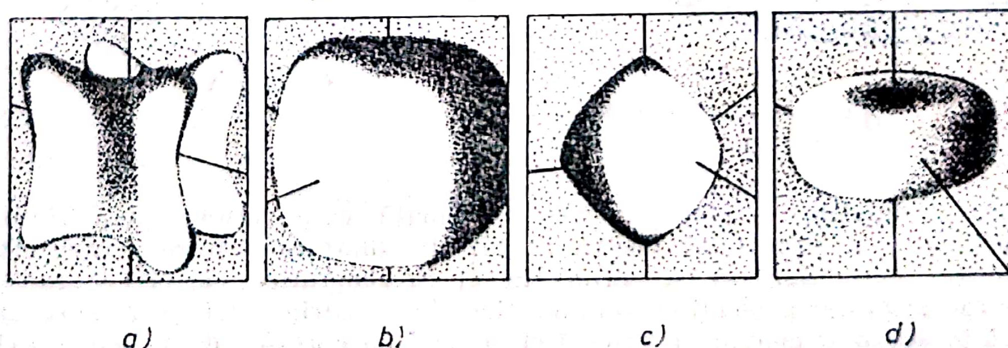


Fig. 24.4. Modele de suprafeţe ale modulului Young: *a*) pentru monocristalul de aur, clasa $m3m$; *b*) pentru aluminiu, clasa $m3m$; *c*) pentru magneziu, clasa $6/mmm$; *d*) pentru zinc, clasa $6/mmm$. Simetria primelor două suprafeţe este $m3m$, iar a celorlalte ∞/mm (Kleber, 1969).

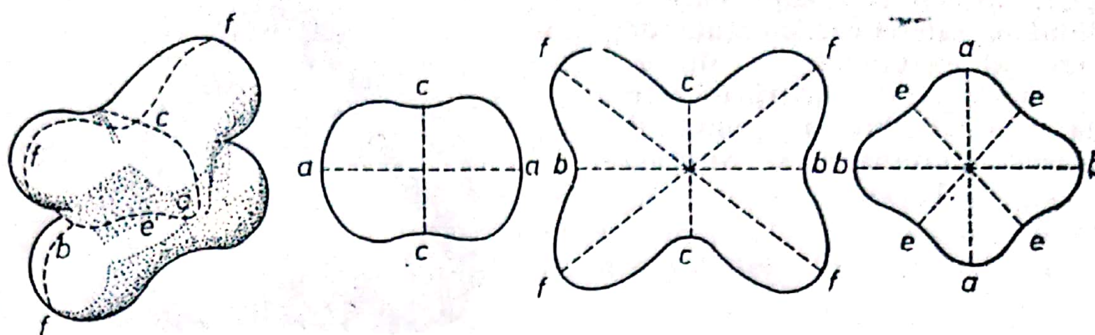


Fig. 24.5. Suprafaţa coeficientului de întindere pentru cristalul de barită, clasa *mmm*, şi secţiunea ei ; literele *a*, *b*, ... indică poziţia secţiunilor în raport cu suprafaţa (Groth, 1897).

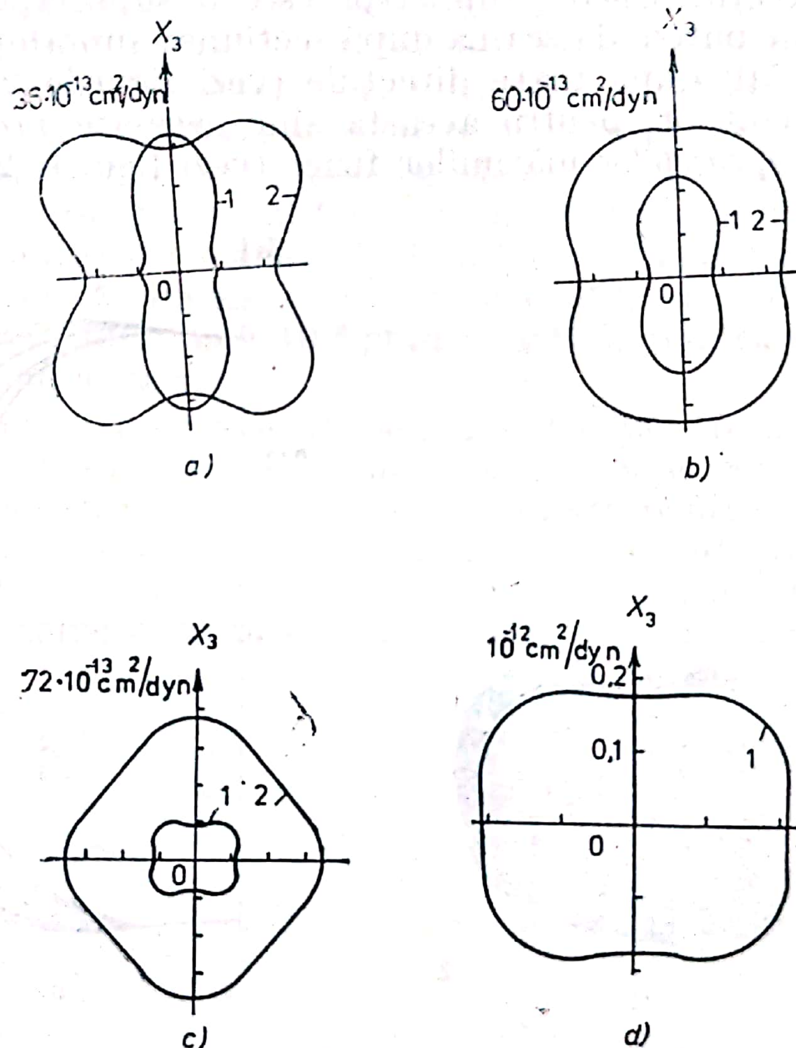
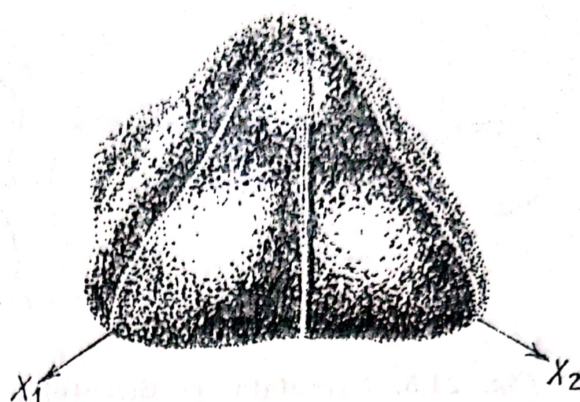


Fig. 24.6. Secţiunile suprafeţelor proprietăţilor elastice, care reprezintă suprafeţe de rotaţie : *a*) pentru cristale de zinc, clasa 6/*mmm* ; *b*) pentru cadmiu, clasa 6/*mmm* ; *c*) pentru sulfura de cadmiu (CdS), clasa 6*mm* ; *d*) pentru carbură de siliciu, clasa 6*mm* ; 1 — secţiunea suprafeţei coeficientului de întindere ; 2— secţiunea suprafeţei coeficientului de torsiune (Butabaev şi Sirotin, 1972).

Fig. 24.7. Jumătatea superioară a modelului suprafeței coeficientului de întindere al cristalului de siliciu, clasa $m3m$ (jumătatea inferioară este reflexia de oglindire a jumătății superioare) (Butabaev și Sirotin, 1971).



evaluarea mărimii caracteristice care o reprezintă numai după anumite direcții. Uneori suprafața este o suprafață de rotație, caz în care ne putem da seama după secțiunea suprafeței de valoarea proprietății după toate direcțiile (vezi figurile 24.3 și 24.6). În restul cazurilor, pentru aceasta sînt necesare *proiecții stereografice ale suprafețelor* mărimilor fizice (vezi figurile 24.1, *b*, 24.2,

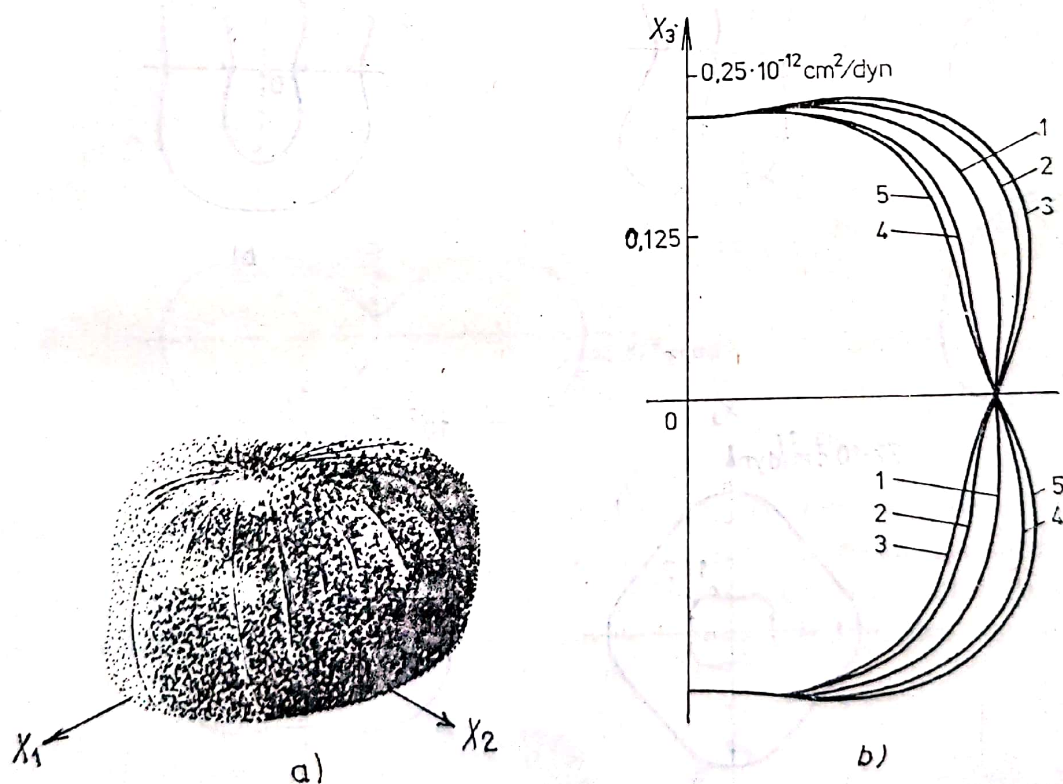


Fig. 24.8. *a*) Jumătatea superioară a modelului suprafeței coeficientului de întindere al cristalului de safir, clasa $\bar{3}m$ (jumătatea ei inferioară se obține din cea superioară prin reflexia într-un centru); *b*) secțiuni ale suprafeței cu planuri verticale: 1 — cu planul care trece prin X_1, 2 — cu planul care se află în urmă față de primul cu $+15°$, 3 — cu $+30°$, 4 — cu $-15°$, 5 — cu $-30°$; semnele unghiurilor corespund rotației în sensul pozitiv al axei $X_2(+)$, sau în sensul negativ al ei $(-)$ (Butabaev și Smîslov, 1971).

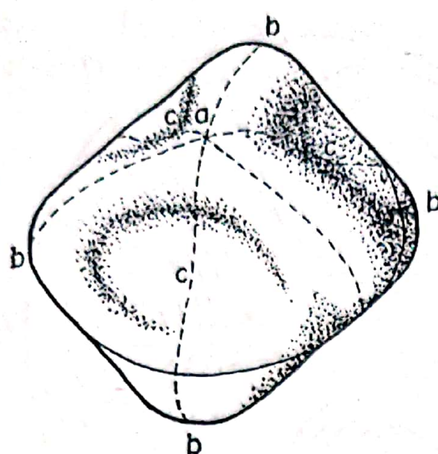


Fig. 24.9. Suprafaţa coeficientului de întindere al cristalului de cuarţ, clasa 32. Notaţiile : *a* — punctul de ieşire al direcţiei [0001] ; *b*, *b* şi *c*, *c* — capetele diametrelor maxime şi, respectiv, minime, care sînt cîte trei de fiecare fel. Linia continuă este secţiunea circulară a suprafeţei cu planul (0001). Liniile punctate sînt secţiuni ale suprafeţei cu planurile $(2\bar{1}\bar{1}0)$. Simetria suprafeţei este $\bar{3}m$ (Groth, 1897).

b, 24.11). Să examinăm, de pildă, figura 24.1, *b*, — proiecţie stereografică a suprafeţei coeficientului de dilatare termică a aragonitului, reprezentată în figura 24.1, *a*. După cum se ştie (vezi § 2), fiecărei direcţii a semisferei superioare îi corespunde un anumit punct al cercului proiecţiei stereografice. Liniile din proiecţia stereografică a suprafeţei sînt formate din punctele care corespund acelor direcţii în care coeficientul de dilatare termică al aragonitului este acelaşi, şi anume acelea în care $\alpha(\theta, \varphi) = 10{,}0$; $11{,}5$; $13{,}0$; . . . ; $32{,}5$; $34{,}0$; $35{,}0 \cdot 10^{-6}$ grad^{-1}. Astfel, acestea sînt liniile de nivel ale funcţiei $\alpha(\theta, \varphi)$.

Proiecţiile stereografice ale suprafeţelor pot fi utilizate ca nomograme pentru determinarea unei mărimi care caracterizează o anumită proprietate în orice direcţie dată sau pentru determinarea unor direcţii în care această mărime are o valoare dată (în particular extremă). Pentru aceasta este necesară o reţea polară de acelaşi diametru ca şi proiecţia considerată ; ea poate fi dese-

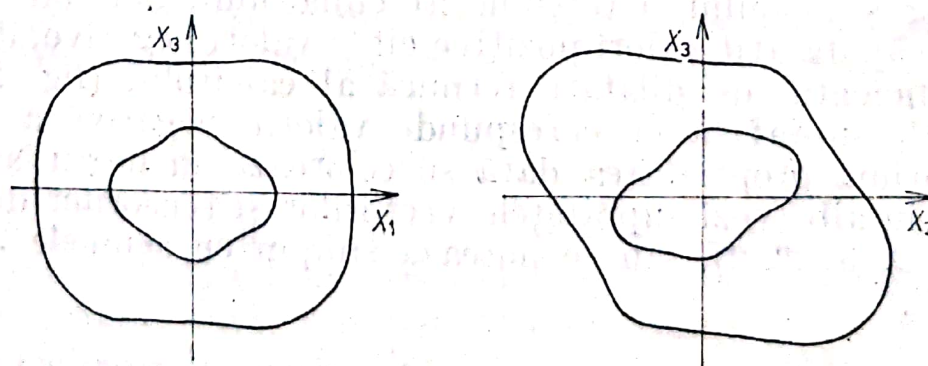


Fig. 24.10. Secţiunile suprafeţelor coeficientului de întindere (în interior) şi a coeficientului de torsiune (în exterior) ale cristalului de cuarţ, clasa 32, cu planurile de coordonate (Wooster, 1949). Compară cu figurile 24.9 şi 24.11 (sistemul de coordonate cristalofizic din figura 24.11 se deosebeşte de cel utilizat aici, fiind rotit cu 180° în jurul axei X_3).

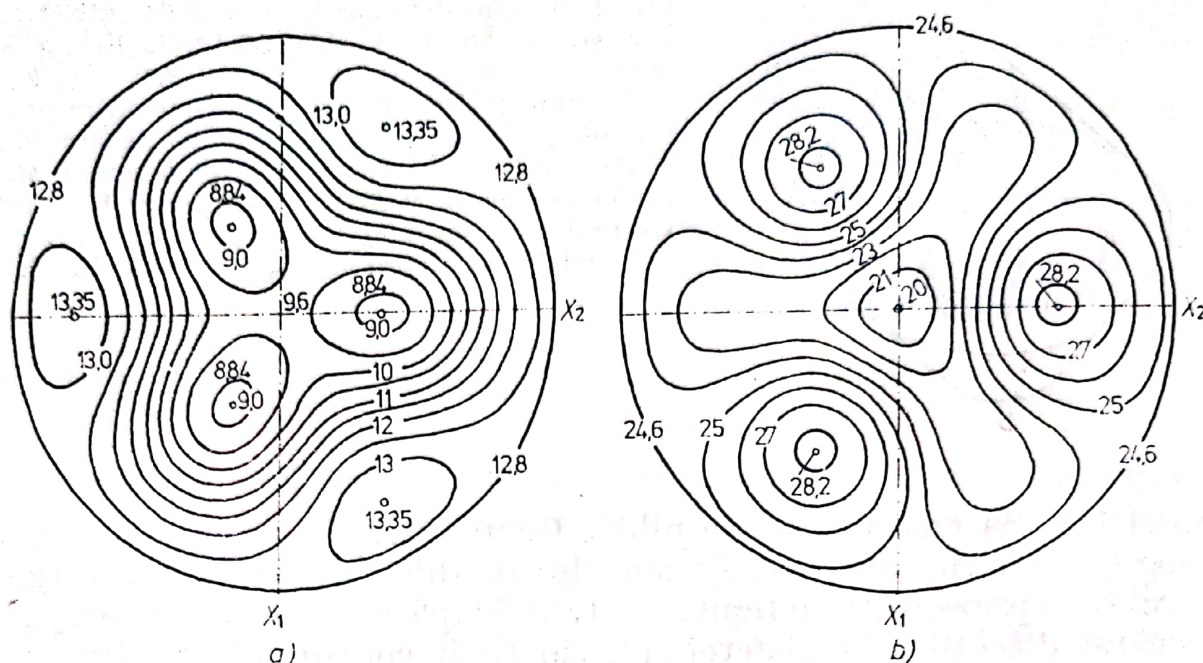


Fig. 24.11. Proiecţia stereografică a suprafeţelor coeficientului de întindere (*a*) şi coeficientului de torsiune (*b*), pentru cristalul de cuarţ, clasa 32, în 10^{-13} cm/dyn. Cercurile inferioare ale proiecţiilor stereografice se obţin din cele reprezentate prin rotirea cu 180° în jurul axei X_1. Se vede că un plan $(2\overline{1}\overline{1}0)$ (în particular planul X_2X_3) este un plan de simetric al acestor suprafeţe, al cărui grup punctual este $\overline{3}m$. Compară cu figurile 24.9 şi 24.10.

nată simplu pe o hîrtie transparentă. Dacă pe reţea sînt trasate planurile şi direcţiile cristalografice, se pot determina şi caracteristicile cantitative ale proprietăţilor acestor planuri şi direcţii, de exemplu, $\alpha_{[hkl]}$, $E_{[uvw]}$ sau $G_{[uvw]}$.

Multe dintre mărimile ce caracterizează proprietăţile cristalelor după orice direcţie sînt pozitive; astfel sînt, de pildă, modulul lui Young şi modulul de torsiune al cilindrului, dar sînt şi altele care pot căpăta atît valori pozitive cît şi valori negative, de exemplu, coeficientul de dilatare termică al calcitului (fig. 24.3, *e*). Partea din suprafaţă ce corespunde valorii negative a mărimii care exprimă proprietatea dată se colorează în negru iar partea pozitivă în alb (vezi suprafeţele vectorilor şi tensorilor de rangul doi, fig. 22.3, 22.2), sau se notează simplu cu semnele „minus" şi „plus".

§ 25. PRINCIPIUL SIMETRIEI ÎN FIZICA CRISTALELOR

Din punctul de vedere al fizicii cristalelor, cele 39 de clase cristalografice şi clase limită constituie 39 de tipuri posibile de interacţiune a anizotropiei cu simetria într-un mediu continuu, sînt 39 de tipuri de confruntare a acestor doi factori. Una dintre

ele — clasa 1 — se caracterizează prin victoria necondiţionată a anizotropiei în această înfruntare : în cristalele acestei clase anizotropia poate apărea pe deplin, nimic nu o stînjeneşte. Două clase limită — $\infty\infty m$ şi $\infty\infty$ — se remarcă însă printr-o înfrîngere zdrobitoare a ei : în mediile care au o astfel de simetrie toate direcţiile sînt echivalente, aceasta însemnînd că în ele, anizotropia este imposibilă. Fiecare dintre celelalte 36 de clase se caracterizează prin restricţii riguros determinate, impuse anizotropiei diferitelor proprietăţi fizice. Aceste limitări reprezintă consecinţa logică a simetriei cristalului.

Problema influenţei simetriei cristalului asupra proprietăţilor lui reprezintă numai o parte din problema mult mai generală, a rolului simetriei în fizică şi, mai mult decît atît, în cunoştinţele teoretice asupra naturii în întregime (vezi Şubnikov şi Kopţik, 1972). Principiul general, care defineşte influenţa simetriei asupra tuturor fenomenelor fizice, fără excepţie, a fost formulat de către Pierre Curie în 1893—1895 : „Cînd anumite principii provoacă anumite consecinţe, atunci elementele de simetrie ale cauzelor trebuie să se manifeste în cadrul consecinţelor provocate de ele.

Cînd în cazul unor fenomene date se manifestă o anumită disimetrie, aceeaşi disimetrie trebuie să apară şi în cauzele care au generat-o*.

Afirmaţiile reciproce acestora nu sînt adevărate, cel puţin în cadrul practicii ; cu alte cuvinte, consecinţele pot avea o simetrie mult mai înaltă decît cauzele care le-au produs" (P. Curie, 1968, p. 22).

Toate proprietăţile cristalelor sînt determinate de structura lor. De aceea, aplicat proprietăţilor cristalelor, principiul Curie susţine că toate elementele de simetrie ale unui cristal sînt în acelaşi timp elemente de simetrie pentru orice proprietate a lui ; invers, orice disimetrie a unei anumite proprietăţi a unui cristal atestă o disimetrie corespunzătoare în construcţia cristalului.

Această afirmaţie poate fi precizată ceva mai bine. Examinînd simetria oricărei proprietăţi macroscopice a unui cristal trebuie să se considere că fizic parametrii unei celule sînt infinit mici, ceea ce se întîmplă şi cu translaţiile elementare în care intră grupul spaţial al cristalului. De aici rezultă două concluzii importante. În primul rînd, din simetria de translaţie a cristalului rezultă omogenitatea cristalului faţă de orice proprietate macroscopică ; cu alte cuvinte, dacă cristalul este analizat ca un mediu

---

* Trebuie făcută distincţie între termenii „asimetrie" şi „disimetrie". „Propunem în deplină concordanţă cu gramatica acestor cuvinte — scrie relativ la aceasta A.V. Şubnikov (1951, p. 160), — ca prin asimetrie să se înţeleagă lipsa simetriei, iar prin disimetrie, defectul în simetrie".

continuu, el trebuie considerat un mediu continuu omogen. În al doilea rînd, dacă translațiile elementare sînt infinit mici, fracțiunile lor sînt cu atît mai mici, de unde rezultă că pentru proprietățile macroscopice, deosebirile dintre axele simple și cele elicoidale, dintre planurile de oglindire și planurile de oglindire cu alunecare, sînt complet neesențiale. Astfel, simetria proprietăților macroscopice ale cristalelor este determinată de grupul punctual de simetrie a cristalului, nu de cel spațial; această concluzie coincide cu cunoscutul principiu al lui Neumann (Neumann, 1885), a cărui formulare modernă se enunță astfel: „Elementele de simetrie ale oricărei proprietăți fizice ale unui cristal trebuie să includă elemente de simetrie ale grupului punctual al cristalului" (importanța fundamentală a acestei afirmații pentru teoria fizicii cristalelor a fost afirmată în repetate rînduri de Voigt, care l-a și denumit principiul Neumann-Voigt, 1928). Astfel, principiul lui Neumann poate fi considerat drept o consecință a principiului Curie, cu toate că a fost stabilit mai înaintea lui și a jucat un rol substanțial în dezvoltarea fizicii cristalelor*.

În limbajul teoriei grupurilor, principiul lui Neumann afirmă că grupul de simetrie al oricărei proprietăți a unui cristal include grupul de simetrie al cristalului însuși, adică grupul de simetrie al cristalului ori coincide cu grupul de simetrie al proprietății, ori este un subgrup al acestuia

$$G_{\text{al proprietății}} \supseteq G_{\text{al cristalului}} \tag{25.1}$$

Relația (25.1) trebuie să fie satisfăcută de grupul de simetrie al oricărei proprietăți a unui cristal. Dacă se consideră un set suficient de larg de diferite proprietăți ale unui cristal dat, atunci singurele elemente de simetrie comune tuturor proprietăților care intră în acest set, fără excepție, sînt elemente de simetrie ale grupului punctual al cristalului. Rezultă deci că grupul punctual al unui cristal este de fapt intersecția (partea comună) grupurilor de simetrie ale tuturor proprietăților posibile ale acestui cristal (Minnigerode, 1887). Kopțik (1960) a studiat seturile minime de proprietăți, după a căror simetrie se definește univoc grupul punctual de simetrie a cristalului.

Simetria suprafețelor. Din principiul Neumann rezultă că toate elementele de simetrie ale grupului punctual al unui cristal

* În cunoscutul manual al lui Nye (1967) principiul lui Neumann este denumit „postulatul fundamental al fizicii cristalelor"; aici a fost dedus din principiul Curie și constituie deci o teoremă, nu un postulat. În calitate de postulat, preferăm să considerăm nu principiul lui Neumann, ci afirmația mai generală — principiul Curie. Acesta însă nu poate fi numit postulat al fizicii cristalelor, deoarece domeniul lui de aplicare este mult mai larg.

constituie totodată elemente de simetrie ale suprafeței oricăreia dintre proprietățile acelui cristal. Totuși suprafața unei proprietăți poate avea și elemente de simetrie pe care cristalul nu le are; în particular, simetria suprafețelor proprietăților este adesea caracterizată de grupurile limită Curie. Așa sînt, de pildă, suprafețele coeficientului de dilatare termică a cristalelor din sistemele trigonal și tetragonal (fig. 24.3) — grupurile de simetrie ale cristalelor, $3m$, $\bar{3}m$, $\bar{4}2m$, sînt de fapt subgrupuri ale grupului de simetrie al suprafeței, ∞/mm. Aceeași simetrie o au și suprafețele întinderii și torsiunii, reprezentate în figura 24.6, simetria cristalelor fiind $6/mmm$ și $6mm$. Simetria suprafeței coeficientului de întindere al safirului (fig. 24.8), $\bar{3}m$, coincide cu simetria cristalului; la fel este și simetria suprafețelor coeficienților de întindere și de torsiune ale cuarțului (fig. 24.9 — 24.11), cu toate că grupul de simetrie al cristalului este mai mic, și anume 32. Simetria mmm a suprafețelor coeficientului de dilatare termică al aragonitului, clasa mmm (fig. 24.1), și al sării Seignette, clasa 222 (fig. 24.2), coincide cu simetria primului dintre cristale și este mai mare decît simetria celui de al doilea. Subliniem faptul că, coincidența dintre simetriile figurilor nu înseamnă nicidecum o identificare între formele lor: astfel, suprafețele modulului Young ale aurului și aluminiului (fig. 24.4, *a*, *b*), magneziului și zincului (fig. 24.4, *c*, *d*), ale coeficientului de dilatare termică al turmalinei și dihidrofosfatului de amoniu (fig. 24.3, *b*, *d*) avînd toate aceeași simetrie, se deosebesc foarte mult ca formă; dimpotrivă, suprafața coeficientului de întindere al safirului (fig. 24.8) este suficient de apropiată ca formă de suprafața coeficientului de torsiune al zincului (fig. 24.6, *a*), cu toate că fiecare are un alt grup de simetrie, $\bar{3}m$ și ∞/mm.

Simetria röntgenogramelor. Cu toate că formarea röntgenogramei unui cristal este determinată de difracția radiațiilor Röntgen pe densitatea periodică a electronilor în spațiu, simetria unei röntgenograme, în concordanță cu principiul Neumann, este definită nu de grupul spațial, ci de grupul punctual al cristalului. În afară de aceasta, simetria figurii de difracție nu depinde de faptul că cristalul are, sau nu, un centru de simetrie. Datorită acestui fapt, simetria unei röntgenograme nu este determinată nici măcar de grupul punctual, ci de grupul sau clasa de difracție Laue — care este o clasă de simetrie centrală mai înaltă a subsistemului în care este cuprins cristalul considerat (vezi § 6). Aplicînd principiul Curie, conchidem de aici că grupul de simetrie al unei röntgenograme, $G_{\text{rön}}$, nu poate fi mai mic decît intersecția grupului de difracție al cristalului, G_L, cu grupul punctual al plăcii fotografice (sau al peliculei foto) $G_{\text{pl}} = \infty m$ (axa este perpendiculară pe

planul plăcii fotografice — simetria unui fascicul de radiaţii Röntgen care cad perpendicular pe placa fotografică este caracterizată de asemenea de grupul G_{pl})

$$G_{\text{rön}} \supseteq G_{\text{L}} \cap \infty m \,; \tag{25.2}$$

găsind intersecţia dintre aceste grupuri, este necesar să se ţină seama de poziţia reciprocă a elementelor lor de simetrie. Aici clasa Laue este

$$G_{\text{L}} = \begin{cases} G, & \text{dacă cristalul are simetrie centrală,} \\ G + \bar{1}G, & \text{dacă cristalul nu are simetrie centrală.} \end{cases} \tag{25.3}$$

În acest fel, după simetria röntgenogramelor se determină numai clasa Laue a cristalului, iar grupul lui spaţial se deduce nu din simetria röntgenogramei, ci din lipsa reflexiilor pe unele, sau altele, dintre planurile cristalografice — din „extincţiile" caracteristice.

Rolul categoriilor în fizica cristalelor. Cea mai simplă şi mai grosieră clasificare a cristalelor este împărţirea lor în trei categorii: superioară, medie şi inferioară (vezi § 4). Grupurile punctuale ale tuturor claselor categoriei inferioare sînt subgrupuri ale grupului mmm, ale categoriei medii — subgrupuri ale grupului ∞/mm, ale categoriei superioare — subgrupuri ale grupului $\infty\infty m$. Însă grupurile mmm, ∞/mm şi $\infty\infty m$ sînt grupurile posibile de simetrie ale tensorului simetric de rangul doi (vezi § 22). Dacă cristalele se subîmpart în categorii după simetria unei anumite proprietăţi, atunci ar fi normal ca această proprietate să fie descrisă de un tensor simetric de rangul doi. Astfel de proprietăţi sînt foarte numeroase; de exemplu, caracterul dublei refracţii a luminii, particularităţile dilatării termice, ale permitivităţii dielectrice şi permeabilităţii magnetice, ale conductibilităţii electrice şi conductibilităţii termice a cristalelor sînt determinate tocmai de categoria căreia îi aparţine cristalul considerat. Toate aceste proprietăţi sînt într-adevăr exprimate prin tensori simetrici de rangul doi (vezi, de exemplu, § 27).

Prin subîmpărţirea cristalelor în categorii este definit caracterul anizotropiei acelor proprietăţi care se exprimă printr-un tensor simetric de rangul doi: cristalele din categoria superioară sînt izotrope faţă de aceste proprietăţi (grupul $\infty\infty m$), cristalele din categoria medie sînt, din punctul de vedere al anizotropiei acestor proprietăţi, asemenea texturilor (grupul ∞/mm) şi numai în cristalele categoriei inferioare anizotropia acestor proprietăţi este într-adevăr caracterizată de grupul cristalografic mmm.

Pe de altă parte, dacă simetria unei proprietăţi nu se reduce la cele trei grupuri enumerate mai sus, se poate afirma că proprietatea respectivă, dacă se exprimă totuşi printr-un tensor, acesta va fi mult mai complicat. Faptul că unele suprafeţe ale proprietăţilor elastice ale cristalelor au simetria $m3m$ (fig. 24.4, *a*, *b* şi 24.7), iar altele, simetria $\bar{3}m$ (fig. 24.8, 24.9, 24.11), constituie o dovadă a faptului că proprietăţile elastice ale cristalelor nu pot fi descrise de tensorii simetriei de rangul doi; şi, într-adevăr, ele sînt exprimate prin tensori de rangul patru (vezi §§ 51, 52).

Disimetria necesară pentru apariţia dublei refracţii. Cea de a doua afirmaţie a principiului Curie susţine că orice disimetrie depistată în orice fenomen trebuie să fie conţinută şi în cauzele care au produs-o. Fenomenele disimetrice pot avea loc numai în medii suficient de disimetrice; disimetria respectivă sau este o caracteristică a mediului dat ca atare, sau este provocată de disimetria acţiunilor exterioare ce se exercită asupra lui.

Să examinăm, de pildă, dubla refracţie a luminii în cristale. Pentru ca aceasta să fie posibilă, planul frontului de undă din cristal trebuie să fie suficient de disimetric: el trebuie să aibă cel puţin două direcţii singulare reciproc perpendiculare, care să poată servi ca direcţii de oscilaţie pentru undele luminoase, ce se propagă în această direcţie. Pentru aceasta, grupul de simetrie al frontului de undă din cristal nu trebuie să fie mai mare decît mmm. Dar acest grup de simetrie reprezintă intersecţia dintre grupul de simetrie al cristalului, G, şi grupul de simetrie al planului, ∞/mm (axă ∞ perpendiculară la plan). Prin urmare, condiţia de existenţă a dublei refracţii are forma

$$G \cap \infty/mm \subseteq mmm, \qquad (25.4)$$

în care axa ∞ coincide cu direcţia de propagare a luminii.

Condiţia (25.4) caracterizează disimetria necesară a planului frontului de undă dintr-un cristal pentru ca să existe dubla refracţie: printre elementele de simetrie ale acestui plan nu trebuie să existe nici un element care nu intră în grupul mmm. Elementele de simetrie care intră în grupul mmm sînt însă indiferente faţă de dubla refracţie: dubla refracţie poate avea loc independent de faptul dacă aceste elemente de simetrie există sau nu. Deci grupul de simetrie mmm defineşte aici tocmai această disimetrie. Din condiţia (25.4) rezultă, în particular, că în cazul propagării undei după o axă de simetrie de ordinul trei sau de un ordin mai mare, nu se va observa dubla refracţie; într-adevăr, o asemenea axă se va include în intersecţia $G \cap \infty/mm$, care, din această cauză, nu va mai face parte din grupul mmm. Condiţia (25.4) este necesară, dar nici pe departe şi suficientă: astfel, în crista-

lele sistemului cubic dubla refracţie nu se observă, chiar în cazurile în care direcţia de propagare a luminii satisface această condiţie.

Dacă mediul în care se propagă lumina nu posedă ca atare disimetria necesară pentru dubla refracţie, el poate fi făcut disimetric supunîndu-l unor acţiuni suficient de disimetrice. Astfel, de exemplu, corpurile izotrope, transparente, şi cristalele sistemului cubic devin birefringente sub acţiunea întinderii mecanice uniaxiale (efectul piezooptic) sau sub acţiunea unui cîmp electric (efectul electrooptic) (vezi §§ 77, 78). Concluzia cea mai importantă care rezultă din exemplele examinate este conţinută în următoarele cuvinte ale lui Pierre Curie: „Unele elemente de simetrie pot coexista cu anumite fenomene, ele nefiind însă necesare. Este necesar să lipsească anumite elemente de simetrie. Aceasta este tocmai acea disimetrie care dă naştere fenomenului" (P. Curie, 1966 p. 101).

§ 26. ECUAŢIILE FUNDAMENTALE ALE ELECTROSTATICII CRISTALELOR

Cîmpul electric într-un cristal, ca şi în orice dielectric, este definit prin vectorul *intensitate a cîmpului electric*, $\boldsymbol{E}$, şi vectorul *polarizare*, $\boldsymbol{P}$. Se utilizează, de asemenea, combinaţia liniară a acestor vectori — vectorul *inducţie electrică*,

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{E} + 4\pi \boldsymbol{P}.$$

Ecuaţiile fundamentale ale electrostaticii sînt

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{E} = 0, \tag{26.1}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{D} = 4\pi\rho, \tag{26.2}$$

ρ fiind densitatea sarcinilor libere, relaţii valabile în egală măsură atît dielectricilor izotropi cît şi celor anizotropi. Din (26.1) rezultă existenţa *potenţialului* φ al cîmpului electrostatic

$$\boldsymbol{E} = -\operatorname{grad} \varphi. \tag{26.3}$$

În interiorul unui cristal, unde nu există sarcini libere,

$$\operatorname{div} \boldsymbol{D} = 0. \tag{26.4}$$

Atît pe suprafaţa cristalelor cît şi pentru suprafaţa de separaţie a dielectricilor, componenta tangenţială $(\mathbf{I}-\boldsymbol{nn})\cdot\boldsymbol{E}$ a cîmpului $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$ este continuă, pe cînd componenta normală $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{D}$ a cîmpului $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r})$ suferă o discontinuitate egală cu $4\pi\rho_{supr}$, unde ρ_{supr} este densitatea de suprafaţă a sarcinilor libere, iar $\boldsymbol{n}$, vectorul unitar al normalei la suprafaţa cristalului. Continuitatea componentelor tangenţiale, $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$, la trecerea prin suprafaţa de separaţie, corespunde continuităţii potenţialului $\varphi(\boldsymbol{r})$ la trecerea prin această suprafaţă. Într-un cristal dielectric, în vecinătatea contactului cu un conductor

$$(\mathbf{I}-\boldsymbol{nn})\cdot\boldsymbol{E}=0, \qquad \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{D}=-4\pi\rho_{supr}, \tag{26.5}$$

cîmpul în conductor fiind egal cu zero. La limita de separare a doi dielectrici componenta normală a inducţiei este continuă.

Toate relaţiile folosite aici sînt aplicabile în aceeaşi măsură atît dielectricilor omogeni cît şi celor neomogeni, atît dielectricilor izotropi cît şi celor anizotropi. Proprietăţile specifice ale unui anumit dielectric (omogenitatea sau neomogenitatea lui, izotropia sau anizotropia, caracteristicile dielectrice cantitative) apar exclusiv în evidenţă în expresia legăturii funcţionale dintre $\boldsymbol{D}$, sau polarizarea $\boldsymbol{P}$ şi intensitatea cîmpului electric, $\boldsymbol{E}$.

Să examinăm, pentru a fixa ideile, legătura dintre $\boldsymbol{P}$ şi $\boldsymbol{E}$. În dielectricii izotropi aceşti vectori sînt proporţionali

$$\boldsymbol{P}=\alpha\boldsymbol{E}, \tag{26.6}$$

unde α este *susceptibilitatea dielectrică* a mediului. Pentru generalizarea relaţiei (26.6) şi la mediile anizotrope, este important să ne dăm seama că în această formulă simplă sînt cuprinse două afirmaţii, complet diferite după natura lor logică.

1. Izotropia unui corp înseamnă că toate direcţiile din el sînt complet identice, atît timp cît corpului nu i se aplică un cîmp electric. Cînd însă corpul se află într-un cîmp electric, în fiecare volum elementar apare o aceeaşi direcţie singulară unică — direcţia vectorului intensitatea cîmpului $\boldsymbol{E}$. De aici rezultă că, dacă un corp izotrop se polarizează în cîmp electric, în fiecare volum elementar vectorul polarizare este paralel cu vectorul $\boldsymbol{E}$ din acelaşi volum

$$\boldsymbol{P}\parallel\boldsymbol{E}. \tag{26.7}$$

Din faptul că mediul este izotrop, rezultă, mai departe, că modulul P al vectorului $\boldsymbol{P}$ depinde numai de modulul E al vectorului $\boldsymbol{E}$, dar nu şi de direcţia lui. Prin urmare,

$$P=f(E). \tag{26.8}$$

Formulele (26.7) şi (26.8) sînt consecinţele directe ale izotropiei mediului.

2. Pentru ca din (26.7) şi (26.8) să rezulte formula (26.6) este necesară o afirmaţie suplimentară — anume că legătura funcţională, care nu este concretizată deloc în (26.8), se reduce la o proporţionalitate directă

$$P = \alpha E. \tag{26.9}$$

Această egalitate nu rezultă din nici o lege fizică, ci înseamnă numai că în dezvoltarea funcţiei $P = f(E)$ după puterile lui E

$$P = P_0 + \left(\frac{\partial P}{\partial E}\right)_{E=0} E + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 P}{\partial E^2}\right)_{E=0} E^2 + \ldots \tag{26.10}$$

O precizie suficientă oferă termenul de gradul întîi în E (în absenţa cîmpului, toate direcţiile dintr-un corp izotrop sînt echivalente şi deoarece prezenţa polarizării ar însemna existenţa unei direcţii deosebite, rezultă că $P_0 = 0$*). Comparînd (26.9) cu (26.10) obţinem

$$\alpha = \left(\frac{\partial P}{\partial E}\right)_{E=0}. \tag{26.11}$$

Desigur la extinderea relaţiei dintre vectorii $\boldsymbol{P}$ şi $\boldsymbol{E}$ asupra mediilor izotrope se poate utiliza ipoteza că această legătură este liniară; argumentul izotropiei mediului trebuie să fie înlocuit cu argumentul influenţei simetriei cristalului asupra proprietăţilor lui dielectrice.

Dezvoltarea (26.10) pentru mediile anizotrope urmează, evident, să fie înlocuită cu dezvoltarea generală

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}^{(0)} + \left(\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial \boldsymbol{E}}\right)_{E=0} \boldsymbol{E} + \ldots, \quad P_i = P_i^{(0)} + \left(\frac{\partial P_i}{\partial E_k}\right)_{E=0} E_k + \ldots, \tag{26.12}$$

afirmaţii cu ajutorul cărora s-a stabilit că în dezvoltarea (26.10) termenul care nu depinde de E este nul, nemaifiind, în mediile

---

* Pentru seignettoelectrici (vezi § 65) această presupunere nu mai este valabilă nici pentru cîmpurile aplicate în mod obişnuit; pentru cîmpuri foarte intense, ea nu mai este în general adevărată (cum ar fi, de exemplu, cîmpul undei electromagnetice al emisiei laser). Însă în majoritatea cazurilor această aproximaţie liniară este complet suficientă, iar noi vom examina astfel de cazuri.

anizotrope, în general vorbind, aplicabile. Prin urmare, forma generală a dependinței liniare a polarizării $\boldsymbol{P}$ de intensitatea cîmpului electric, $\boldsymbol{E}$, pentru mediile anizotrope, are forma

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}^{(0)} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{E}, \quad P_i = P_i^{(0)} + \alpha_{ik} E_k, \tag{26.13}$$

unde tensorul de rangul doi

$$\boldsymbol{\alpha} = \left(\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial \boldsymbol{E}} \right)_{\boldsymbol{E}=0}, \quad \alpha_{ik} = \left(\frac{\partial P_i}{\partial E_k} \right)_{\boldsymbol{E}=0} \tag{26.14}$$

se numește *tensorul susceptibilității dielectrice*, iar vectorul $\boldsymbol{P}^{(0)}$, *vectorul polarizare spontană* (adică de la sine). De aici se obține ușor și legătura dintre inducția electrică, $\boldsymbol{D} = \boldsymbol{E} + 4\pi \boldsymbol{P}$, și intensitatea cîmpului electric, $\boldsymbol{E}$,

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{D}^{(0)} + \boldsymbol{\varkappa} \cdot \boldsymbol{E}, \quad D_i = D_i^{(0)} + \varkappa_{ik} E_k, \tag{26.15}$$

unde tensorul de rangul doi

$$\boldsymbol{\varkappa} = \mathbf{I} + 4\,\pi \boldsymbol{\alpha}, \quad \varkappa_{ik} = \delta_{ik} + 4\pi\, \alpha_{ik} \tag{26.16}$$

se numește *tensorul permitivității dielectrice*, iar vectorul $\boldsymbol{D}^{(0)} = 4\,\pi\, \boldsymbol{P}^{(0)}$, *vectorul inducție electrică spontană*. Vectorul inducție se poate exprima și prin potențialul

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{D}^{(0)} - \boldsymbol{\varkappa} \cdot \operatorname{grad} \varphi, \quad D_i = D_i^{(0)} - \varkappa_{ik} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}. \tag{26.17}$$

În § 57 se va arăta că tensorul $\boldsymbol{\varkappa}$ este simetric

$$\varkappa_{ik} = \varkappa_{ki}; \tag{26.18}$$

de unde rezultă că și tensorul $\boldsymbol{\alpha} = (1/4\,\pi)\,(\boldsymbol{\varkappa} - \mathbf{I})$ este, de asemenea, simetric.

Să notăm o diferență esențială între tensorii examinați aici (printre tensori am inclus aici și vectorii, adică tensorii de rangul întîi) și anume: vectorii intensitate a cîmpului electric, $\boldsymbol{E}$, inducție, $\boldsymbol{D}$, polarizare, $\boldsymbol{P}$, caracterizează cîmpul electric din cristal; toți acești vectori variază cînd cîmpul se schimbă. Dimpotrivă, polarizarea spontană, $\boldsymbol{P}^{(0)}$, și inducția spontană, $\boldsymbol{D}^{(0)}$, precum și tensorii susceptibilitatea dielectrică, $\boldsymbol{\alpha}$, și permitivitatea dielec-

trică, $\varkappa$, nu variază cînd cîmpul electric din cristal se modifică: ei caracterizează proprietățile dielectrice ale cristalului ca atare, independent de mărimea și chiar de existența cîmpului electric exterior, aplicat. Tensorii de primul tip se numesc *tensori de cîmp*, deoarece ei caracterizează cîmpul; tensorii de al doilea tip se numesc *tensori de material*, pentru că ei caracterizează materialul. În fizica mediilor izotrope și în cea a mediilor anizotrope tensorii de cîmp se definesc la fel; toate deosebirile dintre fizica mediilor izotrope și fizica mediilor anizotrope sînt concentrate, dacă se poate spune așa, tocmai în tensorii de material.

§ 27. SIMETRIA PROPRIETĂȚILOR DIELECTRICE ALE CRISTALELOR

După cum s-a remarcat în § 26, cristalele anumitor clase pot să fie polarizate electric și în absența cîmpului electric exterior; o astfel de polarizare se numește *polarizare spontană*, adică ea apare ca urmare a unor cauze interne, fără vreo cauză exterioară, cristalele cu o asemenea polarizare fiind numite *piroelectrici* (sensul acestui termen se va elucida în § 31). Să stabilim care sînt clasele cristalografice cărora le pot aparține cristalele piroelectrice. Polarizarea spontană este dată printr-un vector, adică simetria polarizării coincide cu simetria vectorului, fiind caracterizată de grupul limită ∞m. Conform principiului Neumann, grupurile punctuale de simetrie ale cristalelor piroelectrice trebuie să fie subgrupuri ale acestui grup, astfel încît dintre toate elementele de simetrie pentru ele este permisă numai o singură axă de simetrie de orice ordin și planurile de simetrie ce trec prin ea. Dintre cele 32 de grupuri cristalografice și 7 grupuri punctuale limită, această condiție este satisfăcută numai de 10 grupuri cristalografice și de 2 grupuri limită:

$$1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 6,\ m,\ mm2,\ 3m,\ 4mm,\ 6mm\ ;\ \infty,\ \infty m.$$

Cristalele și texturile celorlalte clase precum și mediile girotrope sau izotrope nu pot avea vectori ai polarizării spontane diferiți de zero, adică nu pot fi piroelectrici.

Dacă un cristal piroelectric are o axă sau un plan de simetrie, evident, vectorul polarizare spontană trebuie să fie orientat după această axă sau trebuie să se afle în acest plan. De aceea, în cristalele din clasa m, conform regulilor de alegere a sistemelor de coordonare cristalografice, vectorul polarizare spontană este

de forma

$$\boldsymbol{P}^{(0)} = P_1^{(0)} \boldsymbol{e}_1 + P_3^{(0)} \boldsymbol{e}_3,$$

iar cristalele clasei 2, de forma

$$\boldsymbol{P}^{(0)} = P^{(0)} \boldsymbol{e}_2 ,$$

în cristalele claselor 3, 4, 6, *mm*2, 3*m*, 4*mm*, 6*mm* și în texturi, de forma

$$\boldsymbol{P}^{(0)} = P^{(0)} \boldsymbol{e}_3$$

(aici $\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$ sînt versorii axelor cristalografice corespunzătoare). Doar pentru cristalele din clasa 1 vectorul $\boldsymbol{P}^{(0)}$ are formă obișnuită în sistemul cristalografic de coordonate.

În cazul variației condițiilor exterioare, de exemplu, a temperaturii, vectorul polarizare spontană, de regulă, se modifică. Însă aceste variații sînt eventual limitate de simetria cristalului. În cristalele cu axă de simetrie, el va putea varia, evident, numai ca mărime, direcția sa coincizînd totdeauna cu direcția axei de simetrie și rămînînd, din această cauză, invariabilă. În cristalele din clasa *m* vectorul $\boldsymbol{P}^{(0)}$ își poate varia nu numai mărimea, ci și direcția, însă astfel încît să nu iasă din planul de simetrie.

Să examinăm influența simetriei cristalelor asupra susceptibilității lor dielectrice. Tensorul susceptibilității dielectrice, $\boldsymbol{\alpha}$, are, ca orice tensor simetric de rangul doi, trei valori proprii; dacă acestea sînt toate diferite între ele, atunci simetria tensorului este *mmm*, dacă două dintre ele coincid, simetria este ∞/mm, dacă toate cele trei coincid, simetria este $\infty\infty m$.

Să găsim care cristale pot avea tensorul $\boldsymbol{\alpha}$, astfel încît toate valorile sale proprii să fie diferite

$$\boldsymbol{\alpha} = \alpha_{(1)}\boldsymbol{u}^{(1)}\boldsymbol{u}^{(1)} + \alpha_{(2)}\boldsymbol{u}^{(2)}\boldsymbol{u}^{(2)} + \alpha_{(3)}\boldsymbol{u}^{(3)}\boldsymbol{u}^{(3)}. \qquad (27.1)$$

Grupurile punctuale de simetrie ale unor astfel de cristale sînt, conform principiului Neumann, fie subgrupuri ale grupului *mmm*, fie coincid cu acest grup. Această condiție este satisfăcută de toate cristalele categoriei inferioare și numai de ele.

Ceva mai complicată este problema analoagă pentru un tensor $\boldsymbol{\alpha}$, ale cărui două valori proprii coincid

$$\boldsymbol{\alpha} = \alpha_{\perp} \mathbf{I} + (\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}) \boldsymbol{kk}. \qquad (27.2)$$

Grupurile punctuale de simetrie ale cristalelor al căror tensor al susceptibilităţii dielectrice are o structură de acest fel trebuie să fie subgrupuri ale grupului ∞/mm. Astfel de grupuri au cristalele din categoria medie şi texturile. La ele două dintre valorile proprii ale tensorului $\boldsymbol{\alpha}$ coincid în mod obligatoriu. Dealtfel, grupurile punctuale ale cristalelor din categoria inferioară sînt subgrupuri ale grupului ∞/mm : cu toate ca tensorul susceptibilităţii dielectrice al acestor cristale poate avea trei valori proprii diferite, simetria cristalelor nu exclude cazul în care două dintre ele coincid. Tensorii de material depind de condiţiile exterioare, de pildă, de temperatură. Chiar în cazul unui cristal din categoria inferioară, pentru o anumită temperatură, două valori proprii ale tensorului $\boldsymbol{\alpha}$ coincid, nu există nici un motiv ca ambele să varieze la fel cu temperatura : tensorul de material avînd o simetrie de un grad atît de înalt nu este caracteristic unui cristal dat, în general, ci numai cristalului dat în condiţii exterioare strict determinate. La cea mai mică variaţie a condiţiilor exterioare tensorul îşi va pierde această simetrie. Prin urmare, în general, tensorul susceptibilităţii dielectrice al oricărui cristal din categoria inferioară are simetria mmm : numai pentru anumite cristale şi în condiţii exterioare, strict determinate, simetria se poate ridica pînă la ∞/mm.

Tensorul susceptibilităţii dielectrice, $\boldsymbol{\alpha}$, cu trei valori proprii care coincid, de forma

$$\boldsymbol{\alpha} = \alpha \mathbf{I} \tag{27.3}$$

are simetria $\infty\infty m$. Un asemenea tensor al susceptibilităţii dielectrice de acest tip este caracteristic cristalelor ale căror grupuri de simetrie punctuale sînt subgrupuri ale grupului $\infty\infty m$, nefiind însă şi subgrupuri ale grupului ∞/mm. Acestea sînt grupurile punctuale ale cristalelor din categoria superioară. Un tensor al susceptibilităţii dielectrice de acelaşi tip este propriu corpurilor izotrope şi celor girotrope.

Substituind tensorul $\boldsymbol{\alpha} = \alpha \mathbf{I}$ în relaţia (26.13) şi observînd că vectorul polarizării spontane al tuturor cristalelor din categoria superioară, al corpurilor izotrope şi al celor girotrope este identic egal cu zero, găsim

$$\boldsymbol{P} = \alpha \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{E} = \alpha \boldsymbol{E}. \tag{27.4}$$

Deci dependenţa polarizării de intensitatea cîmpului electric în cazul cristalelor din categoria superioară este aceeaşi ca şi în cazul corpurilor izotrope — susceptibilitatea lor dielectrică este izotropă.

Să studiem orientarea vectorilor proprii ai tensorului susceptibilității dielectrice față de un sistem de coordonate cristalofizic. Deoarece cristalele din sistemul triclinic nu au axe și planuri de simetrie, vectorii proprii ai tensorului nu trebuie să coincidă cu versorii sistemului de coordonate cristalofizic; dacă în cazul unor condiții exterioare determinate, unul dintre vectorii proprii coincide cu unul dintre versori, la orice modificare a condițiilor exterioare această coincidență, în general vorbind, va dispărea. De aceea, într-un sistem de coordonate cristalofizic tensorul susceptibilității dielectrice al unui cristal din sistemul triclinic are forma

$$\|\alpha_{ij}\| = \begin{Vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{31} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{23} & \alpha_{33} \end{Vmatrix}. \tag{27.5}$$

Pentru cristalele din sistemul monoclinic, versorul $\boldsymbol{e}_2$ este orientat după axa de ordinul doi sau după normala la planul de simetrie. Deoarece elementele de simetrie ale cristalului sînt în același timp și elementele de simetrie ale tensorului $\boldsymbol{\alpha}$, versorul $\boldsymbol{e}_2$ trebuie să coincidă cu unul dintre vectorii proprii ai tensorului $\boldsymbol{\alpha}$, de pildă cu $\boldsymbol{u}^{(2)}$. Astfel, într-un sistem de coordonate cristalofizic

$$\|\alpha_{ij}\| = \begin{Vmatrix} \alpha_{11} & 0 & \alpha_{31} \\ 0 & \alpha_{(2)} & 0 \\ \alpha_{31} & 0 & \alpha_{33} \end{Vmatrix}. \tag{27.6}$$

Toți versorii unui sistem de coordonate cristalofizic, pentru cristalele din sistemul rombic, sînt orientați după axele de simetrie de ordinul doi sau după normalele la planurile de simetrie. Conform principiului Neumann, tensorul susceptibilității dielectrice va avea aceleași axe și planuri de simetrie și, deci, acești versori coincid (cu exactitate de pînă la semn) cu vectorii proprii ai tensorului. Prin urmare,

$$\|\alpha_{ij}\| = \begin{Vmatrix} \alpha_{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{(3)} \end{Vmatrix}. \tag{27.7}$$

Din principiul Neumann mai rezultă și că pentru cristalele din categoria medie și texturi, axa principală de simetrie coincide cu

axa tensorului dielectric; deoarece ea este orientată după e_3,

$$\| \alpha_{ij} \| = \begin{Vmatrix} \alpha_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{\|} \end{Vmatrix}. \qquad (27.8)$$

În sfîrşit, tensorul susceptibilităţii dielectrice pentru cristalele cubice şi corpurile izotrope are, în toate sistemele de coordonate carteziene, incluzînd, fireşte, şi pe cel cristalofizic, o aceeaşi formă

$$\| \alpha_{ij} \| = \begin{Vmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{Vmatrix}. \qquad (27.9)$$

Tensorul susceptibilităţii dielectrice, ca orice tensor de material, depinde de condiţiile exterioare. Cînd ele se modifică, se modifică şi valorile proprii ale tensorului, dar dacă simetria cristalului cere coincidenţa a două sau a tuturor celor trei valori proprii, ele vor continua să coincidă şi în cazul condiţiilor schimbate. Orientarea vectorilor proprii faţă de cristal, în cazul variaţiei condiţiilor exterioare, se modifică şi ea, numai dacă direcţiile acestora nu sînt determinate de simetria cristalului. În cristalele triclinice schimbarea orientării vectorilor proprii nu este limitată în nici un fel de simetria cristalului. În cristalele monoclinice acela dintre vectorii proprii care este orientat după axa de simetrie sau după normala la planul de simetrie este imobil, iar ceilalţi doi se rotesc, în cazul variaţiei condiţiilor exterioare, rămînînd perpendiculari pe acesta şi perpendiculari între ei. În toate celelalte cristale şi în toate texturile, orientarea tensorului susceptibilităţii dielectrice este determinată de simetrie şi, prin urmare, nu se modifică în cazul unor condiţii exterioare variabile.

Am examinat influenţa simetriei cristalului asupra tensorului susceptibilităţii dielectrice, $\boldsymbol{\alpha}$. Asupra tuturor celorlalţi tensori simetrici de rangul doi, care exprimă proprietăţile cristalelor, simetria cristalelor se manifestă exact în acelaşi fel. Totuşi trebuie făcută o diferenţă netă între tensorii care descriu celelalte proprietăţi (de exemplu, tensorul conductibilităţii termice, $\boldsymbol{\lambda}$, vezi § 33) şi alţi tensori care descriu aceeaşi proprietate — tensorul susceptibilităţii dielectrice $\boldsymbol{\varkappa} = \mathbf{I} + 4\pi\boldsymbol{\alpha}$ (tabelul 27.1) şi tensorul insusceptibilităţii dielectrice, $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\varkappa}^{-1}$. Toţi tensorii simetrici de rangul doi, prin care se descriu proprietăţile cristalelor triclinice şi mono-

Tabelul 27.1

Valorile lui $\varkappa_{ij}$ (unități CGSel) pentru unele cristale

	Cristalele				Frecvența de măsurare
Categoria superioară	NaCl $PbCl_2$ Diamant	5,90 33,5 5,68			$10-10^7$ $5\cdot10^5$ $1,6\cdot10^6$
		$\varkappa_{33}$	$\varkappa_{11}$		
Categoria medie	Cuarț	4,27	4,34		$3\cdot10^7$
	Safir	10,55	8,6		$1\cdot10^3-3\cdot10^8$
	Calcit	8,0	8,5		$1\cdot10^3$
	Rutil	200,0	86,4		$1\cdot10^4$
	ADP	16,0	56,0		$1\cdot10^3$
	KDP	20,0	44,0		10^3-10^8
	CdS	10,3	9,3		
		$\varkappa_{11}$	$\varkappa_{22}$	$\varkappa_{33}$	
Categoria inferioară	Sare Seignette	205,0	9,6	9,5	
	Gips	9,9	5,1	5,0	$3\cdot10^8$

clinice sînt raportați la axele principale, pe cînd în cazul tensorilor α, $\varkappa$, η aceste axe coincid, în cazul tensorului λ ele sînt diferite; dacă pentru un cristal oarecare, în condiții exterioare determinate nu mai este valabilă o simetrie înaltă a tensorului α, atunci este aceeași, în acest caz, și simetria tensorilor $\varkappa$ și η, simetria tensorului λ fiind însă normală. Această diferență se explică prin faptul că în cazul tensorilor, α, $\varkappa$, η, vectorii proprii coincid, iar valorile proprii sînt legate prin relațiile

$$\varkappa_{(i)} = 1 + 4\pi\alpha_{(i)}, \quad \eta_{(i)} = 1/\varkappa_{(i)}, \tag{27.10}$$

pe cînd, în cazul tensorului λ vectorii proprii coincid cu vectorii proprii ai tensorului α numai în măsura în care această coincidență este dictată de simetria cristalului, valorile proprii nefiind, în general, legate în nici un fel, de valorile proprii ale tensorului α.

28. CRISTALUL ÎMTR-UN CÎMP ELECTRIC OMOGEN

Condensatorul cu dielectric anizotrop. Să introducem între armăturile unui condensator plan o placă cristalină de suprafață S și grosimea d ($d \ll \sqrt{S}$). Vom considera vectorul unitar $\boldsymbol{n}$ al nor-

malei la placă ; componentele lui într-un sistem de coordonate cristalofizic sînt n_1, n_2, n_3. Presupunînd că componentele tensorului permitivității dielectrice $\varkappa_{ij}$ sînt cunoscute în sistemul de coordonate cristalofizic, să determinăm capacitatea condensatorului, $C(\boldsymbol{n})$.

Deoarece suprafața plăcii este mult mai mare decît pătratul grosimii ei, deformarea cîmpului în apropierea marginilor plăcii poate fi neglijată, iar potențialul φ poate fi considerat că variază numai după grosimea plăcii. Vom lua originea pe una dintre suprafețele armăturii (să zicem, pe cea inferioară ; vezi figura 28.1),

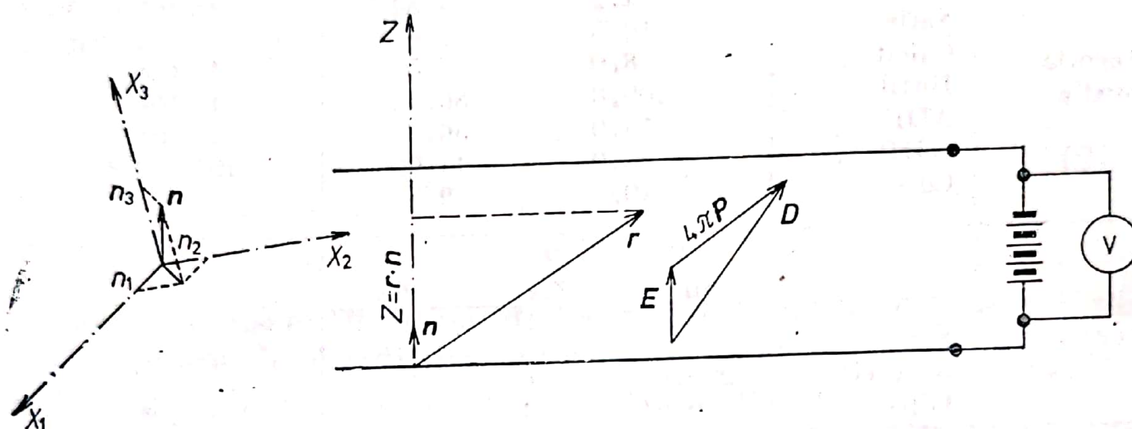


Fig. 28.1. Vectorii intensitate a cîmpului electric, inducție a cîmpului electric și polarizare electrică într-un condensator plan cu un dielectric anizotrop.

considerînd că vectorul $\boldsymbol{n}$ este orientat de la armătura inferioară spre cea superioară. Atunci distanța unui punct, $\boldsymbol{r}$, față de planul inferior, va fi $z = \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{n}$, iar $\varphi = \varphi(z)$. Intensitatea cîmpului electric este

$$\boldsymbol{E} = -\operatorname{grad}\varphi = -\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}\boldsymbol{r}} = -\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}\boldsymbol{n}. \qquad (28.1)$$

Atunci inducția va fi

$$\boldsymbol{D} = -\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}\boldsymbol{\varkappa}\cdot n, \qquad D_i = -\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}\varkappa_{ik}\, n_k, \qquad (28.2)$$

iar ecuația $\operatorname{div}\boldsymbol{D} = 0$ capătă forma

$$\frac{\partial D_i}{\partial x_i} = -\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}z^2} n_i \varkappa_{ik} n_k = 0, \qquad -\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}z^2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n} = 0, \quad (28.3)$$

sau, simplu,

$$\frac{d^2\varphi}{dz^2} = 0.$$

Soluția generală a acestei ecuații este

$$\varphi(z) = Az + B.$$

Diferența de potențial pe armături este egală cu

$$U = \varphi(0) - \varphi(d),$$

astfel încît

$$\varphi(z) = -(U/d)z + \varphi(0), \tag{28.4}$$

$$\boldsymbol{E} = (U/d)\boldsymbol{n}, \quad E_k = (U/d)n_k, \tag{28.5}$$

$$\boldsymbol{D} = (U/d)\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n} \quad D_i = (U/d)\varkappa_{ik}\, n_k. \tag{28.6}$$

Densitatea de suprafață a sarcinii pe armătura inferioară este

$$\rho_{supr} = (1/4\pi)\, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{D},$$

iar întreaga sarcină de pe armătură

$$Q = S\rho_{supr} = (SU/\pi d)\, n.$$

Prin urmare, capacitatea condensatorului este

$$C = Q/U = (S/4\pi d)\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n} = (S/4\pi d)\ \varkappa_{ik}\ n_i\ n_k. \tag{28.7}$$

Dacă se compară rezultatul obținut, cu formula capacității unui condensator cu dielectric izotrop,

$$C = (S/4\pi d)\varkappa, \tag{28.8}$$

atunci se constată că rolul permitivității dielectrice, $\varkappa$, îl are acum $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n}$ — componenta normală a tensorului permitivității dielectrice după perpendiculară la planul plăcii ; de aceea, $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n}$ se numește uneori permitivitatea dielectrică a cristalului în direcția $\boldsymbol{n}$. Însă aceasta nu înseamnă nicide cum că în orice altă problemă de electrostatică a mediilor anizotrope se poate obține un rezultat

corect punînd în soluţia problemei izotrope corespunzătoare pe $\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\varkappa} \cdot \boldsymbol{n}$ în locul lui $\varkappa$: în alte probleme, rolul permitivităţii dielectrice după o anumită direcţie este jucat de cu totul alte mărimi.

Aşa cum s-a arătat în § 21, cunoscînd cele şase componente normale alese ale tensorului, luate în mod adecvat, se pot calcula toate componentele sale. Datorită acestui fapt, măsurînd capacitatea condensatorilor care au şase moduri diferite de orientare a plăcilor tăiate dintr-un acelaşi cristal, se poate calcula tensorul permitivităţii dielectrice al cristalului respectiv, cele şase plăci fiind într-adevăr necesare numai în cazul cristalelor triclinice. Pentru calculul tensorului permitivităţii dielectrice a cristalelor monoclinice este suficient să se facă astfel de măsurători numai pe patru plăcuţe, pentru cristalele rombice, pe trei, pentru cristalele singoniei medii şi pentru toate texturile posibile numai pe două şi, în fine, pentru cristalele cubice, datorită izotropiei dielectrice a lor, numai pe o singură plăcuţă orientată arbitrar.

Simetria cristalului permite, în anumite cazuri, să se simplifice substanţial formula (28.7) (vezi tab. 28.1).

Cristal cu inserţia unui strat plan-paralel, în cîmp electric. Să tratăm următoarea problemă generală: într-un mediu anizotrop nemărginit, caracterizat prin tensorul permitivităţii dielectrice, $\boldsymbol{\varkappa}^{(e)}$, există un strat plan-paralel dintr-un alt material anizotrop cu tensorul permitivităţii dielectrice $\boldsymbol{\varkappa}^{(i)}$. Vom nota vectorul unitar al normalei la planul stratului intercalat, ca de obicei, cu $\boldsymbol{n}$. Fie cîmpul electric din mediul omogen, $\boldsymbol{E}^{(e)}$. Să găsim cîmpul $\boldsymbol{E}^{(i)}$ din strat. Este natural să presupunem că şi acesta este tot omogen. Atunci ecuaţiile diferenţiale ale electrostaticii vor fi satisfăcute identic, rămînînd deci să ne preocupăm numai de satisfacerea condiţiilor la limită. Pentru ca vectorul $\boldsymbol{E}$ să satisfacă condiţiile la limită, este necesar ca vectorii $\boldsymbol{E}^{(e)}$ şi $\boldsymbol{E}^{(i)}$ să se deosebească între ei printr-un vector paralel cu normala $\boldsymbol{n}$

$$\boldsymbol{E}^{(i)} = \boldsymbol{E}^{(e)} + A\boldsymbol{n}. \tag{28.9}$$

Constanta A, deocamdată necunoscută, va fi determinată din condiţiile la limita pentru vectorul inducţiei. Inducţia din mediu este

$$\boldsymbol{D}^{(e)} = \boldsymbol{\varkappa}^{(e)} \cdot \boldsymbol{E}^{(e)}, \tag{28.10}$$

iar din strat va fi

$$\boldsymbol{D}^{(i)} = \boldsymbol{\varkappa}^{(i)} \cdot \boldsymbol{E}^{(i)} = \boldsymbol{\varkappa}^{(i)} \cdot \boldsymbol{E}^{(e)} + A\boldsymbol{\varkappa}^{(i)} \cdot \boldsymbol{n}. \tag{28.11}$$

Tabelul 28.1

Componenta normală, $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n}$, a tensorului permitivității dielectrice, $\boldsymbol{\varkappa}$, exprimată prin componentele vectorului unitar, $\boldsymbol{n}$, și prin indicii Miller (hkl) ai planului perpendicular la $\boldsymbol{n}$

Sistemul triclinic, formulele generale

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n} = \varkappa_{ij}\, n_i\, n_j = \frac{\varkappa_{ij}\, E_i^{\alpha} E_j^{\beta}\, h_{\alpha}\, h_{\beta}}{g^{\gamma\delta}\, h_{\gamma} h_{\delta}}$$

Sistemul monoclinic $(2 \parallel X_2,\ m \perp X_2)$

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n} = \varkappa_{11} n_1^2 + \varkappa_{22} n_2^2 + \varkappa_{33} n_3^2 + 2\varkappa_{31} n_3 n_1 =$$

$$= [h^2b^2c^2\varkappa_{11} + k^2c^2a^2\varkappa_{22}\sin^2\beta + l^2a^2b^2\,(\varkappa_{11}\cos^2\beta + \varkappa_{33}\sin^2\beta - \varkappa_{31}\sin 2\beta) -$$

$$-2lhab^2c\,(\varkappa_{11}\cos\beta - \varkappa_{31}\sin\beta)]/(h^2b^2c^2 + k^2c^2a^2\sin^2\beta + l^2a^2b^2 - 2lhab^2c\cos\beta)$$

Sistemul rombic

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n} = \varkappa_{11} n_1^2 + \varkappa_{22} n_2^2 + \varkappa_{33}\, n_3^2 = \frac{h^2b^2c^2\varkappa_{11} - k^2c^2a^2\varkappa_{22} + l^2a^2b^2\varkappa_{33}}{h^2b^2c^2 + k^2c^2a^2 + l^2a^2b^2}$$

Cristale din categoria medie și texturi

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n} = \varkappa_{11}\,(n_1^2 + n_2^2) + \varkappa_{33}\, n_3^2 = \varkappa_{11} + (\varkappa_{33} - \varkappa_{11})\, n_3^2$$

Sistemul tetragonal

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n} = \frac{(h^2 + k^2)\, c^2\varkappa_{11} + l^2a^2\varkappa_{33}}{(h^2 + k^2)\, c^2 + l^2a^2}$$

Sistemele hexagonalic și trigonal (în configurație hexagonală)

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n} = \frac{4\,(h^2 + k^2 + hk)\, c^2\varkappa_{11} + 3l^2a^2\varkappa_{33}}{4(h^2 + k^2 + hk)\, c^2 + 3l^2a^2}$$

Sistemul cubic și corpurile izotrope

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n} = \varkappa$$

N o t a ț i i l e: h — indicii Miller ai planului, E_i^{α} — matricea care leagă versorii $\boldsymbol{e}_i$ ai sistemului de coordonate cristalofizic cu vectorii fundamentali, $\boldsymbol{a}_{\alpha}$, ai rețelei cristaline: $\boldsymbol{e}_i = E_i^{\alpha}\boldsymbol{a}_{\alpha}$; $g^{\gamma\delta}$ — componentele contravariante ale tensorului metric al rețelei; a, b, c, β — parametrii celulei.

Condițiile la limită pentru $\boldsymbol{D}$ cer ca

$$\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\varkappa}^{(i)} \cdot \boldsymbol{E}^{(e)} + A\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\varkappa}^{(i)} \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\varkappa}^{(e)} \cdot \boldsymbol{E}^{(e)}, \tag{28.12}$$

de unde găsim

$$A = \frac{\boldsymbol{n} \cdot (\boldsymbol{\varkappa}^{(e)} - \boldsymbol{\varkappa}^{(i)}) \cdot \boldsymbol{E}^{(e)}}{\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\varkappa}^{(i)} \cdot \boldsymbol{n}} \tag{28.13}$$

și, în sfîrșit,

$$\boldsymbol{E}^{(i)} = \boldsymbol{E}^{(e)} + \frac{\boldsymbol{n} \cdot (\boldsymbol{\varkappa}^{(e)} - \boldsymbol{\varkappa}^{(i)}) \cdot \boldsymbol{E}^{(e)}}{\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\varkappa}^{(i)} \cdot \boldsymbol{n}} \boldsymbol{n}, \tag{28.14}$$

$$E_j^{(i)} = [\delta_{ji} + (1/\varkappa_{pq}^{(i)}\, n_p\, n_q)\, n_j\, n_k(\varkappa_{ki}^{(e)} - \varkappa_{ki}^{(i)})]\, E_i^{(e)}.$$

Dacă, în particular cîmpul din mediu este perpendicular pe planul stratului intercalat, atunci și cîmpul din intercalație se bucură de această proprietate și este egal, după cum se poate calcula imediat, cu

$$E^{(i)} = \frac{\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\varkappa}^{(e)} \cdot \boldsymbol{n}}{\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\varkappa}^{(i)} \cdot \boldsymbol{n}} E^{(e)} \boldsymbol{n} = \frac{\boldsymbol{n}\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{D}^{(e)}}{\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\varkappa}^{(i)} \cdot \boldsymbol{n}}. \tag{28.15}$$

Să examinăm cele mai importante cazuri particulare, care se reduc la problema enunțată aici.

Lamelă anizotropă într-un cîmp electric omogen. Putem determina imediat cîmpul din lamela, cu ajutorul formulei (28.14), înlocuind în ea pe $\boldsymbol{\varkappa}^{(e)}$ cu tensorul $\mathbf{I}$

$$\boldsymbol{E}^{(i)} = \boldsymbol{E}^{(e)} - \frac{\boldsymbol{n} \cdot (\boldsymbol{\varkappa}^{(i)} - \boldsymbol{I}) \cdot \boldsymbol{E}^{(e)}}{\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\varkappa}^{(i)} \cdot \boldsymbol{n}} \boldsymbol{n}. \tag{28.16}$$

În particular, pentru

$$\boldsymbol{E}^{(e)} = E^{(e)} \boldsymbol{n},$$

vom obține

$$\boldsymbol{E}^{(i)} = \frac{1}{\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\varkappa}^{(i)} \cdot \boldsymbol{n}} E^{(e)} \boldsymbol{n}. \tag{28.17}$$

Cavitate plan-paralelă într-un mediu anizotrop infinit. În acest caz $\varkappa^{(i)} = \mathrm{I}$. Cîmpul din cavitate este

$$\boldsymbol{E}^{(i)} = \boldsymbol{E}^{(e)} + [\boldsymbol{n}\cdot(\varkappa^{(e)} - \mathrm{I})\cdot\boldsymbol{E}^{(e)}]\cdot\boldsymbol{n}. \tag{28.18}$$

Într-un corp izotrop, pentru $\boldsymbol{E}^{(0)} \| \boldsymbol{n}$, vectorul intensitate a cîmpului din strat este egal cu vectorul inducţie electrică în corp

$$\boldsymbol{E}^{(i)} = \boldsymbol{D}^{(e)}.$$

Dacă corpul este anizotrop, această egalitate este satisfăcută numai dacă $\boldsymbol{n}$ este vector propriu al tensorului $\varkappa^{(e)}$, însă în cazul general vectorul

$$\boldsymbol{E}^{(i)} = \boldsymbol{nn}\cdot\boldsymbol{D}^{(e)}$$

este egal cu componenta vectorului inducţie din corp, luată după $\boldsymbol{n}$, şi nu va mai coincide cu vectorul $\boldsymbol{D}^{(e)}$, nici în modul, nici ca direcţie.

Cînd vectorul $\boldsymbol{E}^{(e)}$ este paralel cu cavitatea $(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E}^{(e)} = 0)$ intensitatea cîmpului din corpul izotrop va fi egală cu intensitatea cîmpului din cavitate, pe cînd în mediul anizotrop,

$$\boldsymbol{E}^{(i)} = \boldsymbol{E}^{(e)} + \boldsymbol{nn}\cdot\boldsymbol{D}^{(e)}. \tag{28.19}$$

Termenul al doilea se anulează numai cu condiţia ca vectorul $\boldsymbol{n}$ să fie perpendicular atît pe vectorul $\boldsymbol{E}^{(e)}$, cît şi pe vectorul $\boldsymbol{D}^{(e)}$, în particular cînd $\boldsymbol{n}$ reprezintă unul dintre vectorii proprii ai tensorului $\varkappa^{(e)}$.

Sfera anizotropă în cîmp electric. Fie ca o sferă anizotropă de rază R, al cărei tensor al permitivităţii dielectrice este $\varkappa$, să se afle în cîmpul electric a cărui intensitate la distanţă mare de sferă este $\boldsymbol{E}^{(0)}$. Se cere să se determine cîmpul din interiorul şi din afara sferei.

În cîmp electric sfera se polarizează, dînd astfel naştere în spaţiul înconjurător unui cîmp suplimentar. Să presupunem că el coincide cu cîmpul dipolului, momentul dipolar al sferei depinzînd liniar de $\boldsymbol{E}^{(0)}$

$$\boldsymbol{M} = R^3\gamma\cdot\boldsymbol{E}^{(0)}, \tag{28.20}$$

unde tensorul γ depinde de $\varkappa$, însă nu şi de direcţia vectorului $\boldsymbol{E}^{(0)}$, factorul R^3 fiind introdus din considerente dimensionale. Atunci potenţialul cîmpului din afara sferei va fi egal cu

$$\varphi^{(e)} = -\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{E}^{(0)} + (R/r)^3\,\boldsymbol{r}\cdot\gamma\cdot\boldsymbol{E}^{(0)}. \tag{28.21}$$

Să mai presupunem că în interiorul sferei cîmpul este omogen şi că depinde liniar de $\boldsymbol{E}^{(0)}$; potenţialul său este egal cu

$$\varphi^{(i)} = -\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{E}^{(0)}, \tag{28.22}$$

unde tensorul $\boldsymbol{\beta}$, ca şi $\boldsymbol{\gamma}$, depinde numai de $\boldsymbol{\varkappa}$, însă nu şi de direcţia lui $\boldsymbol{E}^{(0)}$. Potenţialele $\varphi^{(e)}$ şi $\varphi^{(i)}$ satisfac ecuaţiile electrostaticii, iar condiţiile la limită permit determinarea tensorilor $\boldsymbol{\beta}$ şi $\boldsymbol{\gamma}$. Astfel, din condiţia de continuitate a potenţialului de la suprafaţă, rezultă că

$$-\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{E}^{(0)} = -\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{E}^{(0)} + \boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{E}^{(0)},$$

$\boldsymbol{R}$ fiind raza vectoare a unui punct de pe suprafaţa sferei. Înlocuind produsul scalar $\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{E}^{(0)}$ prin expresia egală cu el, $\boldsymbol{R}\cdot\mathbf{I}\cdot\boldsymbol{E}^{(0)}$, şi trecînd toţi termenii în membrul stîng al ecuaţiei, obţinem

$$\boldsymbol{R}\cdot(\boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\beta} - \mathbf{I})\cdot\boldsymbol{E}^{(0)} = 0.$$

Deoarece această egalitate rămîne valabilă pentru orice direcţie posibilă a vectorilor $\boldsymbol{R}$ şi $\boldsymbol{E}^{(0)}$, tensorul din paranteză este egal cu zero, adică

$$\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\gamma} = \mathbf{I}. \tag{28.23}$$

Din continuitatea componentelor normale ale vectorului inducţie electrică, la limita de separaţie, rezultă

$$-\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{E}^{(0)} = -2\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{E}^{(0)} - \boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{E}^{(0)}.$$

De aici, prin acelaşi procedeu, vom obţine

$$\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{\beta} - 2\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{I}. \tag{28.24}$$

Soluţia sistemului celor două ecuaţii liniare în tensorii $\boldsymbol{\beta}$ şi $\boldsymbol{\gamma}$, (28.23) şi (28.24), este de forma

$$\boldsymbol{\beta} = 3(\boldsymbol{\varkappa} + 2\mathbf{I})^{-1} \quad \boldsymbol{\gamma} = (\boldsymbol{\varkappa} - \mathbf{I})\cdot(\boldsymbol{\varkappa} + 2\mathbf{I})^{-1}. \tag{28.25}$$

Acum nu mai prezintă nici o dificultate scrierea expresiei cîmpului, atît în afara sferei cît şi în interiorul ei, pe noi interesîndu-ne, însă, în mod special cîmpul din interiorul sferei. Intensitatea lui este

$$\boldsymbol{E}^{(i)} = 3(\boldsymbol{\varkappa} + 2\mathbf{I})^{-1}\cdot\boldsymbol{E}^{(0)}, \tag{28.26}$$

iar inducţia satisface relaţia foarte interesantă

$$\boldsymbol{D}^{(i)} = 3\boldsymbol{E}^{(0)} - 2\boldsymbol{E}^{(i)}, \tag{28.27}$$

care se deduce cu ajutorul următorului şir de relaţii

$$\boldsymbol{D}^{(i)} = \boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{E}^{(i)} = 3\boldsymbol{\varkappa}\cdot(\boldsymbol{\varkappa} + 2\mathbf{I})^{-1}\cdot\boldsymbol{E}^{(0)} =$$

$$= 3[(\boldsymbol{\varkappa} + 2\mathbf{I}) - 2\mathbf{I}]\cdot(\boldsymbol{\varkappa} + 2\mathbf{I})^{-1}\cdot\boldsymbol{E}^{(0)} =$$

$$= [3\mathbf{I} - 6(\boldsymbol{\varkappa} + 2\mathbf{I})^{-1}]\cdot\boldsymbol{E}^{(0)} = 3\boldsymbol{E}^{(0)} - 2\boldsymbol{E}^{(i)}.$$

§ 29. CÎMPUL ÎN INTERIORUL UNEI CAVITĂŢI SFERICE DINTR-UN MEDIU ANIZOTROP

În paragraful precedent am obţinut o soluţie relativ simplă pentru cazul în care o sferă anizotropă se află în vid şi este dat cîmpul omogen departe de sferă. Problema, ce pare asemănătoare cu aceea în care într-un mediu anizotrop infinit există o cavitate sferică fiind dat un cîmp electric omogen, $\boldsymbol{E}^{(0)}$, departe de sferă, este în realitate cu mult mai complicată. Vom prezenta, fără a face demonstraţia, rezolvarea ei, avînd în vedere deosebita importanţă pe care o prezintă această problemă pentru teoria microscopică a reţelei cristaline (pentru demonstraţie vezi Landau şi Lifşiţ, 1957, §§ 4, 8, 13; în ceea ce priveşte aplicarea acestei probleme în teoria microscopică a reţelei cristaline, vezi Born şi Huang, 1958 şi Kittel — 1962). Se constată că $\boldsymbol{E}^{(i)}$, cîmpul din interiorul cavităţii, este şi în acest caz tot omogen, însă dependenţa lui de $\boldsymbol{E}^{(0)}$, chiar dacă rămîne liniară, este cu mult mai complicată.

Înainte de a transcrie soluţia acestei probleme, să analizăm, plecînd de la principiul Curie, tensorul **S** ca funcţie de un tensor simetric de rangul doi, **T**. Aşa cum s-a arătat în § 22, un tensor simetric de rangul doi **T** este totdeauna invariant în raport cu grupul *mmm*. Din principiul Curie rezultă că tensorul **S** este invariant, într-o măsură mai mică, în raport cu acelaşi grup. Însă, deoarece vectorii proprii ai unui tensor sînt orientaţi după axele de simetrie ale acestui tensor, din principiul Curie rezultă că vectorii proprii ai tensorului-funcţie coincid cu vectorii proprii ai

tensorului-argument*. De aici rezultă clar că toți tensorii care sînt funcții de un tensor simetric de rangul doi, se reduc la forma diagonală în același sistem de coordonate ca și tensorul-argument. Se spune că $\mathbf{S} = f(\mathbf{T})$ dacă în acest sistem

$$\| S \| = \begin{Vmatrix} S_{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & S_{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & S_{(3)} \end{Vmatrix} = \begin{Vmatrix} f(T_{(1)}) & 0 & 0 \\ 0 & f(T_{(2)}) & 0 \\ 0 & 0 & f(T_{(3)}) \end{Vmatrix}.$$

În particular, $\mathbf{S} = \sqrt{\mathbf{T}}$, dacă $S_{(i)} = \sqrt{T_{(i)}}$. În acest fel pot fi considerate chiar și funcționalele unui tensor; este necesar numai ca în întregul domeniu de variație a tensorului-funcție, sistemul său de coordonate proprii să rămînă neschimbat.

Să ne întoarcem acum la problema enunțată la începutul acestui paragraf. Fie $\boldsymbol{\varkappa}$ tensorul coeficienților permitivității dielectrice a mediului anizotrop, iar $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\varkappa}^{-1}$, tensorul coeficienților impermitivității dielectrice a acestuia. Vom trece acum la investigarea tensorilor $\boldsymbol{\mu} = \sqrt{\boldsymbol{\varkappa}}$ și $\boldsymbol{\nu} = \sqrt{\boldsymbol{\eta}}$, precum și a *tensorului coeficienților depolarizării*

$$\mathbf{N} = \frac{1}{2} \sqrt{\det \boldsymbol{\eta}} \int_0^\infty \frac{(\boldsymbol{\eta} + z\mathbf{I})^{-1}\, dz}{\sqrt{\det (\boldsymbol{\eta} + z\mathbf{I})}}. \tag{29.1}$$

Atunci $\boldsymbol{E}^{(i)}$ din cavitate este omogen și depinde de cîmpul la distanță de cavitate, $\boldsymbol{E}^{(0)}$, în felul următor

$$\boldsymbol{E}^{(i)} = [\mathbf{I} - \boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{N} \cdot (\mathbf{I} - \boldsymbol{\eta}) \cdot \boldsymbol{\mu}]^{-1} \cdot \boldsymbol{E}^{(0)}. \tag{29.2}$$

În sistemul propriu de coordonate formulele (29.1) și (29.2) se simplifică substanțial. Din formula (29.2) dispar valorile proprii ale tensorilor $\boldsymbol{\mu}$ și $\boldsymbol{\nu}$ (ele se reduc pur și simplu), această formulă capătă forma

$$E_k^{(i)} = \frac{E_k^{(0)}}{1 - N_{(k)}\,(1 - \eta_{(k)})}. \tag{29.3}$$

* În afară de aceasta, din principiul Curie rezultă că un tensor-funcție este simetric în raport cu indicii dacă tensorul-argument are aceeași proprietate. Chestiunea este că, dacă un tensor de rangul doi este esențial nesimetric în raport cu indicii, adică nu este egal cu tensorul transpus în raport cu el, în grupul său de simetrie cu bunăștiință lipsesc unele operații care intră în grupul *mmm*.

Pentru valorile proprii ale tensorului coeficienţilor depolarizării, din (29.1), obţinem

$$N_{(k)} = \frac{1}{2}\sqrt{\det \boldsymbol{\eta}}\int_0^\infty \frac{dz}{(\eta_{(k)} + z)\sqrt{\det(\boldsymbol{\eta}+z\mathbf{I})}} . \tag{29.4}$$

Integrala din această formulă este o integrală eliptică; ea se exprimă prin cunoscutele *integrale eliptice de speţa întîi* şi de speţa a doua, $F(\varphi, k)$ şi $E(\varphi, k)$*. Presupunînd totuşi că $\eta_{(1)} > \eta_{(2)} > \eta_{(3)}$ şi notînd

$$\varphi = \arcsin\sqrt{\frac{\eta_{(1)} - \eta_{(3)}}{\eta_{(1)}}}, \quad k = \sqrt{\frac{\eta_{(1)} - \eta_{(2)}}{\eta_{(1)} - \eta_{(3)}}},$$

avem

$$N_{(1)} = \frac{\sqrt{\eta_{(1)}\eta_{(2)}\eta_{(3)}}}{(\eta_{(1)} - \eta_{(2)})\sqrt{\eta_{(1)} - \eta_{(3)}}}[F(\varphi, k) - E(\varphi, k)], \tag{29.5, a}$$

$$N_{(2)} = \frac{\sqrt{\eta_{(1)}\eta_{(2)}\eta_{(3)}}}{\eta_{(1)} - \eta_{(2)}}\left[\frac{\sqrt{\eta_{(1)} - \eta_{(3)}}}{\eta_{(2)} - \eta_{(3)}}E(\varphi, k) - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{\sqrt{\eta_{(1)} - \eta_{(3)}}}F(\varphi, k)\right] - \frac{\eta_{(3)}}{\eta_{(2)} - \eta_{(3)}}, \tag{29.5,b}$$

$$N_{(3)} = \frac{\eta_{(2)}}{\eta_{(2)} - \eta_{(3)}} - \frac{\sqrt{\eta_{(1)}\eta_{(2)}\eta_{(3)}}}{(\eta_{(2)} - \eta_{(3)})\sqrt{\eta_{(1)} - \eta_{(3)}}}E(\varphi, k). \tag{29.5, c}$$

---

* Prin definiţie, integrala eliptică de speţa întîi este

$$F(\varphi, k) = \int_0^\varphi d\psi/\sqrt{1 - k^2\sin^2\psi},$$

iar integrala eliptică de speţa a doua este

$$E(\varphi, k) = \int_0^\varphi \sqrt{1 - k^2\sin^2\psi}\, d\psi.$$

Valorile acestor integrale ca funcţii de φ şi de k sînt, de exemplu, în Ianke, Emde şi Lösch (1968).

Adunînd valorile proprii ale tensorului coeficienţilor depolarizării obţinem

$$N_{ii} = 1. \tag{29.6}$$

Pentru cristalele din categoria medie, cînd două dintre valorile proprii ale tensorului coeficienţilor impermitivităţii dielectrice coincid, integralele (29.5) se exprimă prin funcţii elementare. Aici trebuie deosebite două cazuri. Dacă $\eta_{\|} > \eta_{\perp}$, atunci, notînd

$$e = \sin\varphi = \sqrt{\frac{\eta_{\|} - \eta_{\perp}}{\eta_{\|}}},$$

obţinem

$$N_{\|} = 1 - \frac{1}{2e^3}\left[2e - (1 - e^2)\ln\frac{1+e}{1-e}\right], \tag{29.7}$$

$$N_{\perp} = \frac{1}{4e^3}\left[2e - (1 - e^2)\ln\frac{1+e}{1-e}\right].$$

Dacă însă $\eta_{\perp} > \eta_{\|}$ notăm

$$f = \sqrt{\frac{\eta_{\perp} - \eta_{\|}}{\eta_{\|}}},$$

şi atunci

$$N_{\|} = 1 - \frac{1}{f^3}(\operatorname{arctg} f - f), \quad N_{\perp} = \frac{1}{2f^3}(\operatorname{arctg} f - f). \tag{29.8}$$

Formulele (29.7) şi (29.8) se mai pot simplifica dacă anizotropia proprietăţilor dielectrice ale cristalului este slabă. Anume, dacă $e \ll 1$, relaţiile (29.7) pot fi scrise aproximativ sub forma

$$N_{\|} = \frac{1}{3} - \frac{2}{15}e^2, \quad N_{\perp} = \frac{1}{3} + \frac{1}{15}e^2, \tag{29.9}$$

iar formulele (29.8), pentru $f \ll 1$ se vor scrie sub forma

$$N_{\|} = \frac{1}{3} + \frac{2}{15}f^2, \quad N_{\perp} = \frac{1}{3} - \frac{1}{15}f^2. \tag{29.10}$$

Pentru cristalele din sistemul cubic şi pentru corpurile izotrope, din (29.6) obţinem

$$N = \frac{1}{3} N_{ii} = \frac{1}{3}. \tag{29.11}$$

Utilizînd acum relaţia (29.2), găsim

$$\boldsymbol{E}^{(i)} = \frac{3\varkappa}{2\varkappa + 1} \boldsymbol{E}^{(0)}; \tag{29.12}$$

a acest rezultat arhicunoscut se putea ajunge, fireşte, pe o cale complet elementară.

§ 30. CÎMPURILE SARCINII PUNCTUALE ŞI DIPOLULUI ÎNTR-UN MEDIU ANIZOTROP

Să studiem cîmpul unei sarcini punctuale, e, într-un mediu anizotrop, caracterizat de tensorul permitivităţii dielectrice, $\boldsymbol{\varkappa}$. Funcţia de densitate a sarcinilor electrice, $\rho(\boldsymbol{r})$, pentru o sarcină punctuală se reduce, după cum se ştie, la funcţia δ a lui Dirac, înmulţită cu mărimea sarcinii

$$\rho(\boldsymbol{r}) = e\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}^{(0)}),$$

unde vectorul $\boldsymbol{r}^{(0)}$ determină poziţia sarcinii. Luînd originea axelor de coordonate în sarcina punctuală,

$$\operatorname{div} \boldsymbol{D} = 4\pi e\delta(\boldsymbol{r}). \tag{30.1}$$

Deoarece

$$\boldsymbol{D} = -\boldsymbol{\varkappa} \cdot \operatorname{grad} \varphi$$

iar tensorul $\boldsymbol{\varkappa}$ nu depinde de coordonate, din (30.1) rezultă că potenţialul φ satisface ecuaţia

$$\varkappa_{ij} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \, \partial x_j} = -4\pi e\delta(\boldsymbol{r}). \tag{30.2}$$

Să scriem această ecuaţie în sistemul de coordonate $X_1X_2X_3$, construit pe vectorii proprii ai tensorului $\varkappa$:

$$\varkappa_{(1)} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1^2} + \varkappa_{(2)} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_2^2} + \varkappa_{(3)} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_3^2} = -4\pi e \delta(x_1)\, \delta(x_2)\, \delta(x_3). \tag{30.3}$$

Pentru a rezolva ecuaţia (30.3) să facem o substituţie de variabilă: în locul variabilelor x_i vom introduce variabilele $y_i = x_i/\sqrt{\varkappa_{(i)}}$. Folosind, pentru transformarea funcţiei δ, formula $\delta(\varkappa^{1/2}y) = \varkappa^{-1/2}\delta_{(y)}$ obţinem din (30.3)

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y_3^2} = -\frac{4\pi e}{\sqrt{\varkappa_{(1)}\, \varkappa_{(2)}\, \varkappa_{(3)}}}\, \delta(y_1)\, \delta(y_2)\, \delta(y_3). \tag{30.4}$$

Această ecuaţie determină potenţialul cîmpului sarcinii punctuale

$$e' = e/\sqrt{\varkappa_{(1)}\, \varkappa_{(2)}\, \varkappa_{(3)}}$$

în vid; soluţia ei va fi

$$\varphi = e'/\sqrt{y_1^2 + y_2^2 + y_3^2}.$$

În variabilele iniţiale,

$$\varphi = \frac{e}{\sqrt{\varkappa_{(1)}\, \varkappa_{(2)}\, \varkappa_{(3)}}} \left(\frac{x_1^2}{\varkappa_{(1)}} + \frac{x_2^2}{\varkappa_{(2)}} + \frac{x_3^2}{\varkappa_{(3)}} \right)^{-1/2}.$$

Să considerăm tensorul impermitivităţii dielectrice, $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\varkappa}^{-1}$. Observînd că

$$\varkappa_{(1)}\varkappa_{(2)}\varkappa_{(3)} = \det \boldsymbol{\varkappa} = 1/\det \boldsymbol{\eta}$$

iar

$$\frac{x_1^2}{\varkappa_{(1)}} + \frac{x_2^2}{\varkappa_{(2)}} + \frac{x_3^2}{\varkappa_{(3)}} = \eta_{(1)}\, x_1^2 + \eta_{(2)}\, x_2^2 + \eta_{(3)} x_3^2 = \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{r},$$

vom scrie potenţialul cîmpului sarcinii electrice punctuale, e, într-un mediu anizotrop sub forma fără coordonate

$$\varphi = e \sqrt{\frac{\det \boldsymbol{\eta}}{\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{r}}}. \tag{30.5}$$

Ecuaţia

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = \text{const}$$

defineşte suprafeţele echipotenţiale. Din soluţia lui (30.5) rezultă că aceştia sînt nişte elipsoizi

$$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{r} = \text{const} \tag{30.6}$$

şi sînt caracteristici tensorului impermitivităţii dielectrice, $\boldsymbol{\eta}$ (vezi § 22).

Exprimînd raza vectoare, $\boldsymbol{r}$, sub forma $\boldsymbol{r} = r\boldsymbol{p}$, unde r este distanţa de la originea axelor de coordonate, iar $\boldsymbol{p}$ este vectorul unitar al razei, se poate scrie, în loc de (30.5),

$$\varphi = e\sqrt{\frac{\det\boldsymbol{\eta}}{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p}}}\,\frac{1}{r}. \tag{30.7}$$

Compararea acestei formule cu formula analoagă pentru mediul izotrop, $\varphi = e/(\varkappa r)$, arată că rolul de „permitivitate dielectrică în direcţia vectorului unitar $\boldsymbol{p}$" îl are, în această problemă, mărimea

$$\varkappa^{(\varphi)}(\boldsymbol{p}) = \sqrt{\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p}}{\det\boldsymbol{\eta}}}. \tag{30.8}$$

Cunoscînd potenţialul, se poate obţine imediat intensitatea

$$\boldsymbol{E} = -\,\text{grad}\,\varphi = \frac{e\sqrt{\det\boldsymbol{\eta}}}{(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{r})^{3/2}}\,\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{r} \tag{30.9}$$

şi inducţia cîmpului electric

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{E} = \frac{e\sqrt{\det\boldsymbol{\eta}}}{(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{r})^{3/2}}\,\boldsymbol{r}\,; \tag{30.10}$$

calculînd inducţia, am utilizat faptul că tensorii $\boldsymbol{\eta}$ şi $\boldsymbol{\varkappa}$ sînt inversul unuia faţă de celălalt.

Vectorii inducţie electrică, $\boldsymbol{D}$, atît într-un mediu anizotrop, cît şi într-unul izotrop, sînt orientaţi după razele care pleacă din sarcină. Vectorii intensitate a cîmpului electric, $\boldsymbol{E}$, dintr-un mediu anizotrop, în general vorbind, se abat de la aceste raze. Totodată de-a lungul fiecăreia dintre aceste raze, mărimea absolută a inten-

sităţii descreşte după aceeaşi lege, $E(r) \sim 1/r^2$, ca şi într-un mediu izotrop

$$E = \frac{e\sqrt{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p}\det\boldsymbol{\eta}}}{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p})^{3/2}}\,\frac{1}{r^2}. \tag{30.11}$$

Compararea acestei formule cu formula analoagă pentru mediul izotrop, $E = e/(\varkappa r^2)$, permite să se mai introducă încă o „permitivitate dielectrică în direcţia vectorului unitar $\boldsymbol{p}$"

$$\varkappa^{(E)}(\boldsymbol{p}) = \sqrt{\frac{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p})^3}{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p}\det\boldsymbol{\eta}}}. \tag{30.12}$$

Prin urmare, se poate introduce o mulţime de definiţii diferite ale „permitivităţii dielectrice într-o anumită direcţie"; din această cauză, este necesar să se precizeze clar, despre care anume mărime este vorba, în fiecare caz în parte.

Generalizarea directă a problemei cîmpului sarcinii punctuale este reprezentată de problema cîmpului dipolului. Să examinăm un sistem de sarcini punctuale, e_n, care se află în punctele $\boldsymbol{r}^{(n)}$. Potenţialul cîmpului unui asemenea sistem este egal cu suma potenţialelor fiecărei sarcini punctuale în parte, adică

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = \sum_n e_n \sqrt{\frac{\det\boldsymbol{\eta}}{(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}^{(n)})\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}^{(n)})}}. \tag{30.13}$$

Să analizăm cîmpul departe de sarcini. În acest caz, este convenabil să se presupună că originea coordonatelor este luată undeva în vecinătatea sarcinilor, astfel încît punctul de observaţie va fi considerat departe de sarcini cînd $r \gg r^{(n)}$. Să dezvoltăm (30.13) în serie, păstrînd primii doi termeni. Deoarece

$$(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}^{(n)})\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}^{(n)}) \approx \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}^{(n)}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{r}^{(n)} =$$

$$= \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{r}\left(1 - \frac{2\boldsymbol{r}^{(n)}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{r}}{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{r}}\right)$$

(aici s-a folosit faptul că tensorul $\boldsymbol{\eta}$ este simetric), iar pentru $\varepsilon \ll 1$ sînt valabile egalităţile aproximative

$$\frac{1}{\sqrt{1-2\varepsilon}} \approx \frac{1}{1-\varepsilon} \approx 1+\varepsilon,$$

atunci din (30.13) obținem

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{\det \eta}{\boldsymbol{r}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{r}}} \sum_n e_n \left(1 + \frac{\boldsymbol{r}^{(n)}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{r}}{\boldsymbol{r}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{r}} + \ldots\right), \quad (30.14)$$

Primul termen al acestei dezvoltări este potențialul cîmpului sarcinii totale, $e = \sum_n e_n$. Pe noi ne interesează cîmpul unui sistem de sarcini neutru ca întreg, cînd $e = 0$, fiind diferit de zero următorul termen al dezvoltării. Atunci cîmpul este definit în primul rînd cu ajutorul momentului dipolar

$$\boldsymbol{M} = \sum_n e_n \boldsymbol{r}^{(n)} \quad (30.15)$$

al sistemului de sarcini, potențialul lui fiind

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\det \eta}\, \frac{\boldsymbol{M}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{r}}{(\boldsymbol{r}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{r})^{3/2}}. \quad (30.16)$$

Intensitatea cîmpului este

$$\boldsymbol{E} = \operatorname{grad}\varphi = \sqrt{\det \eta}\, \frac{3(\boldsymbol{M}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{r})\,\eta\cdot\boldsymbol{r} - (\boldsymbol{r}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{r})\,\eta\cdot\boldsymbol{M}}{(\boldsymbol{r}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{r})^{5/2}}, \quad (30.17)$$

iar inducția

$$\boldsymbol{D} = \varkappa\cdot\boldsymbol{E} = \sqrt{\det \eta}\, \frac{3(\boldsymbol{M}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{r} - (\boldsymbol{r}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{M}}{(\boldsymbol{r}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{r})^{5/2}}, \quad (30.18)$$

Pentru a separa în aceste formule dependențele de direcție pe de o parte, de dependența de distanța dintre punctul de observație și dipol pe de alta, folosim, din nou, vectorul unitar al razei, $\boldsymbol{p}$,

$$\varphi = \sqrt{\det \eta}\, \frac{\boldsymbol{M}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{p}}{(\boldsymbol{p}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{p})^{3/2}}\, \frac{1}{r^2}, \quad (30.19)$$

$$\boldsymbol{E} = \sqrt{\det \eta}\, \frac{3(\boldsymbol{M}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{p})\,\eta\cdot\boldsymbol{p} - (\boldsymbol{p}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{p})\,\eta\cdot\boldsymbol{M}}{(\boldsymbol{p}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{p})^{5/2}}\, \frac{1}{r^3}, \quad (30.20)$$

$$\boldsymbol{D} = \sqrt{\det \eta}\, \frac{3(\boldsymbol{M}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{p})\,\boldsymbol{p} - (\boldsymbol{p}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{p})\,\boldsymbol{M}}{(\boldsymbol{p}\cdot\eta\cdot\boldsymbol{p})^{5/2}}\, \frac{1}{r^3}. \quad (30.21)$$

Într-un mediu izotrop singurul plan dintre suprafețele echipotențiale este planul care trece prin dipol, fiind totodată perpendicular la vectorul momentului dipolar, $\boldsymbol{M}$. În mediul anizotrop, un rol analog îl joacă planul care trece, de asemenea, prin dipol, însă este perpendicular nu pe vectorul $\boldsymbol{M}$, ci pe vectorul $\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{M}$. Într-un mediu izotrop, în toate punctele care se află pe axa dipolului ($\boldsymbol{p}\parallel\boldsymbol{M}$), vectorii $\boldsymbol{E}$ și $\boldsymbol{D}$ sînt orientați după aceeași axă ($\boldsymbol{E}\parallel\boldsymbol{D}\parallel\boldsymbol{M}$). Într-un mediu anizotrop, în aceste puncte numai vectorul $\boldsymbol{D}$ este orientat după axa dipolului, vectorul $\boldsymbol{E}$ fiind paralel cu vectorul $\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{M}$. În mediul anizotrop descreșterea potențialului și a valorilor absolute ale vectorilor cîmpului odată cu îndepărtarea de dipol, după oricare dintre raze, este aceeași ca și într-un mediu izotrop: potențialul scade ca $1/r^2$, intensitatea și inducția, ca $1/r^3$.

31. PIROELECTRICII

Se numesc *cristale piroelectice* cristalele caracterizate prin faptul că vectorul polarizării spontane, $\boldsymbol{P}^{(0)}$, sau al inducției spontane, $\boldsymbol{D}^{(0)} = 4\pi\,\boldsymbol{P}^{(0)}$, este diferit de zero. Ecuația de material a electrostaticii, pentru cristalele piroelectrice

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{D}^{(0)} + \boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{E}, \tag{31.1}$$

împreună cu ecuațiile electrostaticii și condițiile la limită, permit să se explice comportarea acestor cristale în absența cîmpurilor exterioare. Să examinăm, de pildă, o sferă de raza R, dintr-un cristal piroelectric; vom utiliza în acest scop, ca și în problema sferei cristaline din § 28, tensorii nedeterminați $\boldsymbol{\beta}$ și $\boldsymbol{\gamma}$, care depind numai de $\boldsymbol{\varkappa}$. Este firesc să ne așteptăm ca momentul dipolar al sferei să fie egal cu

$$\boldsymbol{M} = R^3\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{D}^{(0)}, \tag{31.2}$$

cîmpul în exteriorul sferei fiind determinat de acest moment dipolar, așa că potențialul lui este

$$\varphi^{(e)} = (R/r)^3\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{D}^{(0)}, \tag{31.3}$$

cîmpul din interiorul sferei fiind omogen

$$\varphi^{(i)} = -\,\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{D}^{(0)}. \tag{31.4}$$

Din condițiile la limită obținem

$$\boldsymbol{R}\cdot(\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\gamma})\cdot\boldsymbol{D}^{(0)}=0, \tag{31.5}$$

$$\boldsymbol{R}\cdot(\varkappa\boldsymbol{\beta}-2\boldsymbol{\gamma}+\mathbf{I})\cdot\boldsymbol{D}^{(0)}=0, \tag{31.6}$$

unde $\boldsymbol{R}$ este raza vectoare a unui punct oarecare de pe suprafața sferei. Soluția problemei electrostatice nu s-ar schimba dacă am putea să-i comunicăm cristalului după bunul nostru plac, înainte încă de experiență, o anumită inducție spontană, $\boldsymbol{D}^{(0)}$, fără a modifica prin aceasta permitivitatea lui dielectrică $\varkappa$, și deci și a tensorilor $\boldsymbol{\beta}$ și $\boldsymbol{\gamma}$. Prin urmare direcțiile vectorilor $\boldsymbol{R}$ și $\boldsymbol{D}^{(0)}$ se pot considera arbitrare și se poate trece deci de la egalitățile (31.5) și (31.6) la ecuațiile tensoriale

$$\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\gamma}=0, \quad \varkappa\cdot\boldsymbol{\beta}-2\boldsymbol{\gamma}+\mathbf{I}=0.$$

Rezolvîndu-le, obținem

$$\boldsymbol{\gamma}=-\boldsymbol{\beta}=(\varkappa+2\mathbf{I})^{-1}. \tag{31.7}$$

În concluzie, în jurul unui piroelectric apare un cîmp cu intensitatea

$$\boldsymbol{E}^{(e)}=-\operatorname{grad}\varphi^{(e)}=(R^3/r^5)(3\boldsymbol{rr}-r^2\mathbf{I})(\varkappa+2\mathbf{I})^{-1}\cdot\boldsymbol{D}^{(0)}, \tag{31.8}$$

care descrește cu distanța de la cristal, ca $1/r^3$, pe cînd, în interiorul cristalului apare un cîmp omogen cu intensitatea

$$\boldsymbol{E}^{(i)}=-(\varkappa+2\mathbf{I})^{-1}\cdot\mathbf{D}^0 \tag{31.9}$$

și cu inducția

$$\boldsymbol{D}^{(i)}=\boldsymbol{D}^{(0)}+\varkappa\cdot\boldsymbol{E}^{(i)}=-(\varkappa+2\mathbf{I})\cdot\boldsymbol{E}^{(i)}+\varkappa\cdot\boldsymbol{E}^{(i)}=-2\boldsymbol{E}^{(i)}, \tag{31.10}$$

care, după cum se vede, nu mai este egală cu inducția spontană. Cîmpul vectorului inducție și cîmpul vectorului intensitate sînt reprezentate în figura 31.1.

Cristalele piroelectrice de altă formă, în absența cîmpului electric exterior, se vor comporta analog. Cîmpul din interiorul lor nu va mai fi desigur omogen, însă ceea ce este important, de regulă, el este diferit de zero. Ele dau naștere, de asemenea, în jurul lor unui cîmp, care coincide ce-i drept, cu cîmpul dipolu-

16—•. 292 49

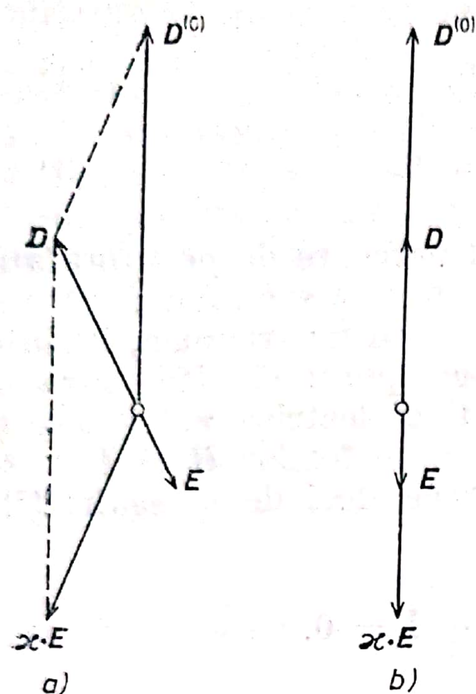


Fig 31.1. Aranjarea reciprocă a vectorilor inducție spontană și cîmp electric într-o sferă dintr-un cristal piroelectric : *a*) clasa 1 sau *m* ; *b*) oricare dintre celelalte clase de piroelectrici.

lui numai la distanțe cu mult mai mari decît dimensiunile liniare ale cristalului, în apropiere fiind însă deformat într-un grad mai mare sau mai mic, în funcție de forma cristalului. Existența însă a unor cîmpuri, atît în exteriorul cît și în interiorul cristalului, este o trăsătură comună tuturor cristalelor piroelectrice, independent de forma lor.

Este evident că în condițiile reale de existență a cristalelor este exclusă posibilitatea unei existențe nelimitate, a acestor cîmpuri. Toți dielectricii prezintă totdeauna o anumită conductibilitate, chiar dacă este foarte mică, totdeauna însă diferită de zero, ceea ce face ca în consecință, în cristal să apară un transport lent de sarcină ; cîmpul creat de sarcinile transportate spre suprafață va acționa atît împotriva cîmpului din exteriorul cristalului, cît și a cîmpului din interiorul lui. În afară de aceasta, în atmosferă se află totdeauna o anumită cantitate de ioni care, sub acțiunea cîmpului existent în exteriorul cristalului, vor fi atrași în funcție de semnul sarcinii lor, de o anumită porțiune a suprafeței cristalului, cîmpurile ionilor vor fi, de asemenea de semn contrar cîmpului cristalului și, în cele din urmă, îl vor compensa.

Din această cauză, proprietățile piroelectrice ale unui cristal se observă și se măsoară, variind temperatura suficient de rapid deoarece polarizarea spontană depinde de temperatură. De aici și denumirea fenomenului însuși — piroelectricitate („piros" — în limba greacă înseamnă foc). Așadar, se măsoară nu polarizarea

spontană însăşi, ci numai variaţia ei cu temperatura. În prima aproximaţie, ea este liniară

$$\boldsymbol{P}^{(0)}(T) - \boldsymbol{P}^{(0)}(T_0) = \boldsymbol{p}(T - T_0). \quad (31.11)$$

Vectorul $\boldsymbol{p}$ se numeşte *vectorul coeficienţilor piroelectrici*. Caracteristica fundamentală însă a unui piroelectric, care determină posibilitatea utilizării lui practice, este *factorul de calitate piroelectric*, $p/\varkappa$, adică raportul dintre mărimea absolută a coeficientului piroelectric, p, şi componenta normală a tensorului permitivităţii dielectrice în direcţia axei piroelectrice, $\varkappa = \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{p}/p^2$.

Utilizarea practică a efectului piroelectric a devenit posibilă numai de cîţiva ani (faţă de 1975 — anul apariţiei lucrării în limba rusă — n.red.), cînd a fost asimilată producţia industrială de cristale cu valori mari ale coeficientului piroelectric (mai ales a seignettoelectricilor — grupă importantă şi specifică de piroelectrici; vezi, despre ele § 65) (tabelul 31.1). În primul rînd,

Tabelul 31.1

Valorile coeficientului piroelectric, în unităţi CGSel, pentru unele cristale

Substanţa	p	Clasa de simetrie
Turmalină	1—1,3	$3m$
Acid tartric	7,8	2
Etilendiamintartrat	2,3—2,6	2
Sulfat de litiu, monohidrat	23—30	2
Selenat de litiu, monohidrat	17,1	2
Boracit	1—3	2
Niobat de litiu	60—200	$3m$
Titanat de bariu, monocristal	50—100	$4mm$
Ceramica PZT (zirconat-titanat de plumb)	3,5—5,0	∞m
KDP (dihidrofosfat de kaliu) ($\sim T_{\text{Curie}}$, într-un cîmp de 8,5 kV/cm)	1600	$mm2$

trebuie să menţionăm aici sulfatul de litiu şi selenatul de litiu, la care valoarea coeficientului piroelectric este cu un ordin de mărime mai mare decît la toate cristalele piroelectrice cunoscute pînă acum. Deficienţa noilor piroelectrici constă însă în dependenţa puternică a coeficientului piroelectric de temperatură şi instabilitatea, astfel determinată, a efectului piroelectric. Un efect piroelectric considerabil îl au şi unele texturi, în special ceramica şi titanatul de bariu.

Cristalele piroelectrice se utilizează la termometrele electrice, care permit măsurarea temperaturii cu o exactitate de pînă la 10^{-6} grade, precum şi la construirea unor receptori sensibili de

fluxuri termice cu variaţie rapidă, în particular, a radiaţiei infraroşii. Din acest punct de vedere, utilizarea cristalelor piroelectrice are o perspectivă extraordinară.

§ 32. CURENTUL ELECTRIC CONTINUU ÎN CRISTALE

În cristalele conductoare ia naştere, în cazul în care există cîmpul electric $\boldsymbol{E}$, un curent electric, avînd densitatea $\boldsymbol{j}$. Ecuaţiile de bază ale curentului continuu în mediul anizotrop sînt aceleaşi ca şi într-un mediu izotrop

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{E} = 0, \tag{32.1}$$

de unde rezultă existenţa potenţialului φ:

$$\boldsymbol{E} = -\operatorname{grad} \varphi, \tag{32.2}$$

şi ecuaţia de continuitate a curentului

$$\operatorname{div} \boldsymbol{j} = 0. \tag{32.3}$$

La trecerea curentului electric, pe unitatea de volum a materialului conductor şi în unitatea de timp se disipă cantitatea de căldură

$$Q = \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{j}. \tag{32.4}$$

În cristale legea lui Ohm se înlocuieşte prin funcţia liniară generală

$$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{E}, \tag{32.5}$$

sau

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{j}, \tag{32.6}$$

în care tensorul de rangul doi, $\boldsymbol{\sigma}$, se numeşte *tensorul conductivităţii electrice*, iar $\boldsymbol{\rho} = \boldsymbol{\sigma}^{-1}$, *tensorul rezistivităţii*. Cu ajutorul acestor tensori, căldura Joule, Q, poate fi exprimată în două forme echivalente

$$Q = \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{E} = \sigma_{ik} E_i E_k, \tag{32.7}$$

$$Q = \boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{j} = \rho_{ik} j_i j_k. \tag{32.8}$$

Termodinamica proceselor ireversibile permite o precizare esențială a formulelor (32.5) și (32.6). În primul rînd, cu toate că simetria cristalelor claselor piroelectrice nu exclude apariția în expresiile (32.5) și (32.6) a unor termeni constanți $\boldsymbol{j}^{(0)}$ și, respectiv, $\boldsymbol{E}^{(0)}$, termodinamica proceselor ireversibile conchide că acești termeni trebuie să lipsească. În al doilea rînd, tensorii $\boldsymbol{\sigma}$ și $\boldsymbol{\rho}$ trebuie să fie simetrici. În al treilea rînd, toate valorile lor proprii trebuie să fie pozitive (vezi § 76).

Influența simetriei cristalelor asupra conductivității lor electrice se studiază exact la fel ca și influența simetriei asupra proprietăților dielectrice. Remarcăm că vectorii proprii ai tensorilor proprietăților dielectrice și ai tensorilor care caracterizează conductivitatea electrică coincid numai în cazurile în care direcțiile lor sînt definite prin elementele de simetrie ale cristalelor. Vectorii proprii ai tensorilor σ și ρ coincid însă totdeauna, dat fiind că acești tensori sînt reciproc inverși.

Să calculăm conductivitatea electrică a unei lamele cristaline de arie S și grosimea d ($d \ll \sqrt{S}$); vectorul unitar al normalei la lamelă este $\boldsymbol{n}$. Pentru că fețele lamelei trebuie să fie metalizate cîmpul din ea coincide cu cîmpul condensatorului plan

$$\boldsymbol{E} = (U/d)\boldsymbol{n}, \qquad (32.9)$$

unde U este diferența de potențial dintre fețele lamelei. Prin urmare, densitatea de curent este

$$\boldsymbol{j} = (U/d)\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}, \qquad (32.10)$$

iar curentul total prin lamelă va fi

$$I = S\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{j} = (SU/d)\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}. \qquad (32.11)$$

Astfel, componenta normală a tensorului conductivității joacă în acest caz rolul conductivității electrice după direcția dată. Rezistența lamelei cristaline fiind egală însă cu

$$\frac{U}{I} = \frac{d}{S}\,\frac{1}{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}}, \qquad (32.12)$$

rezultă că drept rezistivitate a lamelei în direcția $\boldsymbol{n}$ trebuie considerată mărimea $1/(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})$; în general, ea nu este egală cu componenta normală $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{n}$ a tensorului rezistivității.

Să examinăm problema contrară, într-un anumit sens, celei de pînă acum, adică să calculăm rezistența unei bare cristaline de lungime d și suprafață a secțiunii transversale S $(d \gg \sqrt{S})$; vectorul unitar $\boldsymbol{n}$ definește direcția axei barei. Evident, în acest caz

$$\boldsymbol{j} = (I/S)\,\boldsymbol{n}, \tag{32.13}$$

de unde

$$\boldsymbol{E} = (I/S)\boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{n}, \tag{32.14}$$

iar diferența de potențial de la capetele barei este

$$U = d\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E} = (Id/S)\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{n}. \tag{32.15}$$

În această situație rolul de rezistivitate în direcția $\boldsymbol{n}$ este jucat de componenta normală a tensorului rezistivității, $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{n}$, iar rolul de conductivitate electrică, de inversa mărimii ei, $1/(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{n})$.

Din aceste două probleme se poate trage concluzia că expresii ca „mărimea rezistivității după o anumită direcție", „mărimea conductivității electrice după o anumită direcție" și, în general, „mărimea care caracterizează o proprietate într-o anumită direcție" capătă un sens bine definit numai după ce este desemnată situația în care este măsurată acea proprietate (vezi formulele (30.8) și (30.12)).

§ 33. CONDUCTIBILITATEA TERMICĂ A CRISTALELOR

Conductibilitatea termică a corpurilor solide izotrope se definește plecîndu-se de la proporționalitatea dintre fluxul termic, $\boldsymbol{q}$, și gradientul de temperatură, grad T,

$$\boldsymbol{q} = -\lambda\,\mathrm{grad}\;T \tag{33.1}$$

(se ia semnul minus pentru ca coeficientul de conductibilitate termică, λ, să poată fi considerat totdeauna pozitiv : fluxul termic este orientat în sensul scăderii temperaturii). Generalizarea imediată a acestei legi, pentru corpurile anizotrope, este

$$\boldsymbol{q} = -\boldsymbol{\lambda}\,\mathrm{grad}\;T. \tag{33.2}$$

Această formulă este complet analoagă formulei din teoria conductibilității electrice a cristalelor, (32.4), care poate fi scrisă sub

forma

$$\boldsymbol{j} = -\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\text{grad}\ \varphi. \qquad (33.3)$$

Tensorul conductibilității termice, $\boldsymbol{\lambda}$, ca și tensorul conductivității electrice, $\boldsymbol{\sigma}$, este simetric și toate valorile lui proprii sînt pozitive.

Evident, div $\boldsymbol{q}$ este egală cu cantitatea de căldură care iese din unitatea de volum a corpului, în unitatea de timp. Variația temperaturii în acest volum, în unitatea de timp, este egală cu —div $\boldsymbol{q}$, împărțită la căldura specifică a unității de volum, adică la $c\rho$, unde c este căldura specifică (căldura specifică a unității de masă), iar ρ densitatea. De aici rezultă ecuația conductibilității termice a cristalelor

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{1}{c\rho}\,\text{div}\,\boldsymbol{q} = \frac{1}{c\rho}\,\text{div}\,(\boldsymbol{\lambda}\cdot\text{grad}\ T). \qquad (33.4)$$

Deoarece tensorul conductibilității, $\boldsymbol{\lambda}$, ca și ρ și c, nu depinde de coordonate, se poate introduce *tensorul de difuzibilitate termică*,

$$\boldsymbol{k} = (1/\rho c)\boldsymbol{\lambda}$$

și se scrie ecuația conductibilității termice sub forma

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k_{ij}\frac{\partial^2 T}{\partial x_i\,\partial x_j} \qquad (33.5)$$

Dacă în fiecare punct al corpului $\partial T/\partial t = 0$, atunci avem de-a face cu un flux staționar, invariabil în timp. În acest caz renunțînd la factorul $1/c\rho$, care acum nu are valoare, obținem din (33.5) ecuația

$$\lambda_{ij}\frac{\partial^2 T}{\partial x_i\,\partial x_j} = 0, \qquad (33.6)$$

complet analoagă cu ecuația potențialului din teoria curentului continuu. În aceste condiții, conductibilitatea termică a barelor și a lamelelor cristaline se va calcula, evident, cu ajutorul unor formule complet analoage celor care au fost deduse în paragraful precedent. Diferența de potențial corespunde acum diferenței de temperatură, intensității curentului — cantitatea de căldură care trece într-o secundă prin bară sau lamelă, intensității cîmpului electric — gradientul de temperatură luat cu semnul schimbat, vectorului densitate de curent — vectorul flux termic.

Să examinăm cîmpurile termice care apar în cristale în cazul unei încălziri uniforme, adică în cazul creşterii temperaturii mediului înconjurător cu viteza constantă, h grad/s. Evident, o răcire uniformă se tratează exact la fel, numai că h se consideră negativ. După o anumită perioadă de stabilizare (această durată este proporţională cu pătratul dimensiunilor liniare ale corpului, invers proporţională cu difuzibilitatea termică şi depinde de condiţiile schimbului de la suprafaţa corpului, mărindu-se substanţial odată cu înrăutăţirea condiţiilor schimbului de căldură), se poate considera, cu suficientă exactitate, că în fiecare punct al cristalului temperatura creşte cu viteza h. Atunci soluţia ecuaţiei conductibilităţii termice, (33.5), se poate căuta de forma

$$T(\boldsymbol{r},\, t) = \Phi(\boldsymbol{r}) + ht\,; \tag{33.7}$$

Funcţia Φ satisface ecuaţia

$$k_{ij}\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i\,\partial x_j} = h. \tag{33.8}$$

Fie ca o lamelă cristalină de grosime $2a$ să se încălzească uniform de pe suprafaţa $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r} = \pm\, a$. Aici $\boldsymbol{n}$ este vectorul unitar al normalei la planul lamelei, $\boldsymbol{r}$ este o rază vectoare, măsurată dintr-un punct oarecare ce se află în planul median al lamelei. Să introducem coordonata $z = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r} = n_i x_i$. Evident, temperatura este funcţie de z şi de timpul t, iar

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial z}{\partial x_i}\,\frac{\partial}{\partial z} = n_i\,\frac{\partial}{\partial z}\,.$$

Ecuaţia (33.8) se scrie acum sub forma

$$k_{ij}n_i n_j\,\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}z^2} = h \tag{33.9}$$

şi, deoarece temperatura mediului este aceeaşi pe ambele feţe ale lamelei, $\Phi(-a) = \Phi(a)$. Deci, soluţia ecuaţiei (33.9) are forma

$$\Phi(z) = \frac{h}{2\,k_{ij}n_i n_j}\,z^2 + B, \tag{33.10}$$

unde B este o constantă deocamdată necunoscută, care se determină din condiţiile la limită. În particular, dacă se consideră

că temperatura $T(\pm a, t)$ de la suprafaţa cristalului este egală cu temperatura $T_0(t)$ a mediului înconjurător, atunci

$$B = T_0(0) - \frac{ha^2}{2k_{ij}\, n_i\, n_j}.$$

De obicei cristalele se încălzesc în aer, sau într-un alt gaz. În acest caz temperatura straturilor superficiale ale cristalului este decalată într-o măsură mai mare, sau mai mică, faţă de temperatura mediului înconjurător. Condiţia la limită corespunzătoare acestei situaţii, dacă nu se ţine cont de schimbul de căldură pe seama radiaţiei, este de forma

$$\frac{\partial T(\pm a, t)}{\partial z} = \pm H[T_0(t) - T(\pm a, t)], \qquad (33.11)$$

unde coeficientul H caracterizează condiţiile schimbului de căldură la limita dintre cristal şi mediul înconjurător : $H = 0$ corespunde absenţei totale a unui flux termic prin suprafaţa cristalului, iar pentru $H \to \infty$ temperatura straturilor superficiale ale cristalului $T(\pm a, t)$ tinde la temperatura mediului înconjurător, $T_0(t)$. Cu condiţiile la limită (33.11)

$$B = T_0(0) - \frac{ha^2}{2k_{ij}\, n_i\, n_j} - \frac{ha}{Hk_{ij}\, n_i\, n_j};$$

evident că ultimul termen caracterizează tocmai decalarea temperaturii straturilor de la suprafaţa cristalului faţă de temperatura mediului înconjurător.

Determinarea coeficientului H este dificilă ; în particular, pînă în prezent nu s-a studiat experimental dependenţa lui de direcţia normalei la faţa cristalului adiacentă mediului. Totuşi unele informaţii importante asupra distribuţiei temperaturii în cristal se pot obţine şi fără a cunoaşte acest coeficient. Aşa cum se va arăta în § 55, pentru calculul tensiunilor care apar într-un cristal la încălzirea (sau răcirea) lui, este suficient să se cunoască diferenţa dintre temperatura cristalului într-un anumit punct, $T(z, t)$ şi temperatura lui medie, $\langle T(t) \rangle$. În acest caz,

$$\langle T(t) \rangle = \frac{1}{2a} \int_{-a}^{a} T(z, t)\, dz.$$

Cînd se calculează diferenţa $T - \langle T \rangle$, termenul B, ca şi termenul hlt, dispare, astfel încît pentru cazul unei încălziri uniforme a cristalului cu viteza h, obţinem

$$T - \langle T \rangle = \frac{ha^2}{2k_{ij}n_i n_j}\left[\left(\frac{z}{a}\right)^2 - \frac{1}{3}\right]. \qquad (33.12)$$

Asupra simetriei proprietăţilor fizice ale cristalelor vezi: P. Curie (1966); Wigner (1971) precum şi manualele de fizică a cristalelor: Voigt (1928); Wooster (1949, 1958); Şubnikov, Flint şi Boki (1940); Nye (1967); Kopţik (1958); Bhagavantam (1966); Mason (1966); Kleber, Meyer, Schoenborn (1968); Vasilev (1972); Perelomova şi Taghieva (1972).

Asupra proprietăţilor electrice şi asupra conductibilităţii termice a cristalelor vezi cărţile: Ioffe (1932); Born şi Huang (1958); Landau şi Lifşiţ (1957 şi 1965); Jdanov (1961); Kittel (1962); Jeludev (1968 şi 1969); Karslow şi Eger (1964); Varikaş şi Haceatrean (1969); Slater (1969).

CAPITOLUL 4

PROPRIETĂȚILE OPTICE ALE CRISTALELOR

§ 34. UNDELE ELECTROMAGNETICE ÎN CRISTALELE TRANSPARENTE

Propagarea undelor electromagnetice printr-un cristal nemagnetic transparent este dată de ecuațiile lui Maxwell,

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{H} = \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial t}, \tag{34.1}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{D} = 0, \quad \operatorname{div} \boldsymbol{H} = 0, \tag{34.2}$$

şi de ecuaţia de material,

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{D}, \quad E_i = \eta_{ik} D_k . \tag{34.3}$$

În aceste ecuaţii $\boldsymbol{E}$ şi $\boldsymbol{H}$ sînt vectorii intensitatea cîmpului electric şi, respectiv, al cîmpului magnetic, $\boldsymbol{D}$ este vectorul inducţie electrică, iar c este viteza luminii. Lipsesc termenii care corespund curentului electric şi sarcinii libere, în virtutea ipotezei că cristalul este transparent, adică este un dielectric ideal. Dacă cristalul nu este un cristal magnetic, vectorii intensitate a cîmpului magnetic, $\boldsymbol{H}$, şi a inducţiei magnetice, $\boldsymbol{B}$, sînt egali unul cu altul.

Tensorul permitivitate dielectrică, $\boldsymbol{\eta}$, depinde de frecvenţă; în cazul frecvenţelor optice ($\omega \sim (2{,}5 - 5).10^{15}$ s^{-1}), adică în domeniile ultraviolet, vizibil şi infraroşu ale spectrului, valorile lui proprii sînt cu mult mai apropiate de 1 decît în cîmpurile statice sau uşor variabile. Pentru majoritatea cristalelor, valorile proprii ale lui $\boldsymbol{\eta}$ (în domeniul vizibil al spectrului) sînt cuprinse în limitele de la 0,17, pentru diamant pînă la 0,62, pentru gheaţă. Ca şi în electrostatică, tensorul $\boldsymbol{\eta}$ este simetric: demonstrarea acestei afirmaţii este bazată pe termodinamica proceselor ireversibile (vezi Landau şi Lifşiţ, 1957, §§ 76, 88; acolo este demonstrat că tensorul permitivitate dielectrică este simetric; este clar că şi tensorul invers faţă de permitivitatea dielectrică, adică tensorul impermitivităţii dielectrice este tot simetric).

Dacă un cîmp electric variabil se propagă în cristal sub formă de unde electromagnetice plane, atunci variaţia vectorilor

de cîmp, **E**, **D**, **H**, în funcţie de coordonatele spaţiale, **r**, şi de timpul t este dată de formulele

$$\boldsymbol{E}(r,t) = \boldsymbol{E}_0 \exp\,(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \mathrm{i}\,\omega t)$$

$$\boldsymbol{D}(r,t) = \boldsymbol{D}_0 \exp\,(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \mathrm{i}\,\omega t) \tag{34.4}$$

$$\boldsymbol{H}(r,t) = \boldsymbol{H}_0 \exp\,(\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \mathrm{i}\omega t).$$

Aici ω este pulsaţia, iar **k** este vectorul de undă. El este perpendicular la planul frontului de undă, fiind legat de celelalte caracteristici prin relaţiile

$$\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\boldsymbol{m} = \frac{\omega}{v}\boldsymbol{m} = \frac{\omega}{c}n\boldsymbol{m}, \tag{34.5}$$

în care **m** este vectorul unitar al normalei undei, λ este lungimea de undă, v este viteza de fază a undei. Raportul dintre viteza undei electromagnetice în vid şi viteza de fază a ei într-un anumit mediu,

$$n = c/v \tag{34.6}$$

se numeşte *indice de refracţie* al undei electromagnetice în mediul respectiv. Această definiţie a indicelui de refracţie este valabilă şi pentru o undă în mediul anizotrop.

Aşa cum s-a mai remarcat, extinzînd asupra mediilor anizotrope acele caracteristici ale substanţei, care se folosesc în fizica mediilor izotrope, trebuie să se indice exact procedeul de generalizare. În definiţia dată, aceasta s-a şi făcut : în optica mediilor izotrope indice de refracţie, n, al unui mediu dat, pe de o parte este egal cu

$$n = \sin i/\sin r,$$

i fiind unghiul de incidenţă, iar r, unghiul de refracţie, iar pe de altă parte este egal cu raportul dintre viteza de fază în vid şi viteza de fază în mediul respectiv, (34.6). Tocmai această a doua proprietate a indicelui de refracţie se utilizează pentru generalizarea acestei noţiuni şi asupra mediilor anizotrope.

Într-o undă electromagnetică ce se propagă printr-un mediu anizotrop, relaţiile spaţiale dintre vectorii de cîmp, **D**, **H** şi **E**

sînt mult mai complicate decît cele referitoare la un mediu izotrop. Ele sînt exprimate prin ecuaţiile Maxwell, (34.1) şi (34.2); în aceste ecuaţii trebuie înlocuite expresiile (34.4) pentru vectorii de cîmp ai undei. Acţiunea operaţiilor rot, div şi d/dt asupra funcţiilor vectoriale exponenţiale de forma (34.4) se reduce la înmulţirea vectorială şi scalară cu $i\boldsymbol{k}$ şi, respeciv cu $-i\omega$. Din această cauză, pentru undele plane, ecuaţiile (34.1) capătă forma

$$\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{H} = -\frac{\omega}{c} \boldsymbol{D}, \quad \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{E} = \frac{\omega}{c} \boldsymbol{H}, \tag{34.7}$$

iar ecuaţiile (34.2), forma

$$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{D} = 0, \ \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{H} = 0. \tag{34.8}$$

Ecuaţiile (34.8) exprimă doar perpendicularitatea vectorilor $\boldsymbol{D}$ şi $\boldsymbol{H}$ pe vectorul de undă $\boldsymbol{k}$; deoarece aceasta rezultă deja din ecuaţiile (34.7) se poate pur şi simplu face abstracţie de ecuaţiile (34.8). Vectorii $\boldsymbol{D}$ şi $\boldsymbol{H}$ se află în planul frontului de undă — la aceasta se reduce afirmaţia că undele electromagnetice în mediile anizotrope sînt transversale. Pe lîngă aceasta, din ecuaţiile (34.7) rezultă şi perpendicularitatea dintre vectorii $\boldsymbol{H}$ şi $\boldsymbol{D}$, precum şi dintre vectorii $\boldsymbol{H}$ şi $\boldsymbol{E}$ (fig. 34.1).

Deci, într-un mediu anizotrop se conservă perpendicularitatea şi concordanţa de fază a vectorilor $\boldsymbol{E}$ şi $\boldsymbol{H}$ precum şi a vectorilor $\boldsymbol{D}$ şi $\boldsymbol{H}$, însă nu se menţine coliniaritatea dintre $\boldsymbol{D}$ şi $\boldsymbol{E}$.

Împărţind ecuaţiile (34.7) la ω/c, vom pune ecuaţiile Maxwell pentru undele electromagnetice plane într-un mediu anizotrop, sub forma

$$n\boldsymbol{m} \times \boldsymbol{H} = -\boldsymbol{D}, \ n\boldsymbol{m} \times \boldsymbol{E} = \boldsymbol{H}. \tag{34.9}$$

Eliminînd din ele intensitatea cîmpului magnetic, $\boldsymbol{H}$, obţinem relaţia dintre vectorul intensitate a cîmpului electric şi vectorul inducţie electrică dintr-o undă electromagnetică plană

$$n^2\boldsymbol{m} \times (\boldsymbol{m} \times \boldsymbol{E}) = -\boldsymbol{D},$$

care, după transformări elementare, capătă forma

$$\boldsymbol{E} - \boldsymbol{m}\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{E} = \frac{1}{n^2} \boldsymbol{D}. \tag{34.10}$$

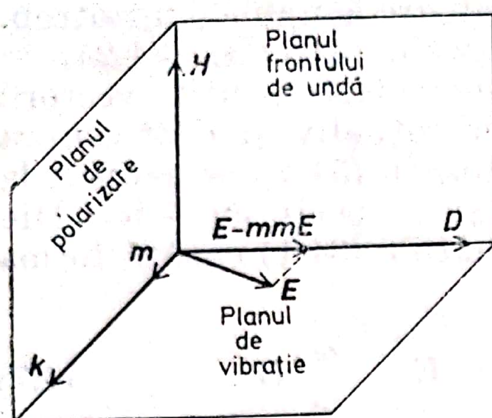


Fig. 34.1. Relațiile spațiale dintre vectorii de cîmp ai undei electromagnetice într-un mediu anizotrop diamagnetic.

Membrul din stînga al relației (34.10) reprezintă componenta vectorului $\boldsymbol{E}$, care se află cuprins în planul frontului de undă (fig. 34.1). Ea este coliniară cu vectorul inducție electrică, raportul dintre modulul ei și modulul vectorului inducție fiind egal cu pătratul raportului dintre viteza undei în mediu și viteza ei în vid. Unda electromagnetică este, ca și pînă acum, transversală, însă în planul frontului de undă, de data aceasta, se află numai vectorii inducție, vectorii intensitate putînd să iasă în afara acestui plan.

Cu ajutorul ecuației de material, (34.3), să eliminăm și intensitatea cîmpului electric din relația (34.10)

$$(\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{mm}\cdot\boldsymbol{\eta})\cdot\boldsymbol{D} = \frac{1}{n^2}\boldsymbol{D}, \quad (\eta_{ik} - m_i m_j \eta_{ik}) D_k = \frac{1}{n^2} D_i. \tag{34.11}$$

Ecuația vectorială obținută definește viteza și polarizarea undei electromagnetice care se propagă prin cristal în direcția $\boldsymbol{m}$. Pentru studiul ei, să introducem un sistem de coordonate cartezian, special, $X_1X_2X_3$: axa X_3 este orientată după normala la undă ($\boldsymbol{e}_3 = \boldsymbol{m}$), iar axele reciproc perpendiculare, X_1 și X_2, se vor afla în planul frontului de undă. Ținînd cont că în sistemul de coordonate special, datorită transversalității vectorului inducției electrice, $D_3 = 0$, vom transcrie ecuația vectorială (34.11), în acest sistem

$$\begin{aligned} \eta_{11}D_1 + \eta_{12} D_2 &= n^{-2} D_1, \\ \eta_{12}D_1 + \eta_{22}D_2 &= n^{-2} D_2; \end{aligned} \tag{34.12}$$

ea s-a redus la numai două ecuații scalare, deoarece a treia reprezintă o identitate banală, 0 = 0.

Sistemul de ecuații (34.12) arată că n^{-2} este o valoare proprie a unui tensor simetric bidimensional, avînd componentele

$$\begin{Vmatrix} \eta_{11} & \eta_{12} \\ \eta_{12} & \eta_{22}, \end{Vmatrix}$$

$\boldsymbol{D}$ fiind vectorul său propriu. Este normal să numim tensorul acesta proiecția tensorului impermitivității dielectrice în planul frontului de undă. Deoarece el este bidimensional, va avea totdeauna două valori proprii; ele sînt rădăcinile ecuației pătratice

$$\begin{vmatrix} \eta_{11} - n^{-2} & \eta_{12} \\ \eta_{12} & \eta_{22} - n^{-2} \end{vmatrix} = 0; \tag{34.13}$$

fiind egale, evident, cu

$$n_{1,2}^{-2} = \frac{1}{2} \left[(\eta_{11} + \eta_{22}) \pm \sqrt{(\eta_{11} - \eta_{22})^2 + (2\eta_{12})^2}\right]. \tag{34.14}$$

Prin urmare, viteza undelor electromagnetice, care se propagă prin cristal într-o direcție $\boldsymbol{m}$, va fi egală fie cu $v_{(1)} = c/n_{(1)}$, fie cu $v_{(2)} = c/n_{(2)}$.

Fiecărei valori proprii $n_{(q)}^{-2}$ îi corespunde vectorul său propriu $\boldsymbol{D}^{(q)}$. Direcția vectorului inducție electrică, într-o undă care se propagă cu viteza $v_{(1)}$, este dată de oricare dintre următoarele ecuații echivalente

$$(\eta_{11} - n_{(1)}^{-2})\, D_1^{(1)} + \eta_{12}\, D_2^{(1)} = 0, \tag{34.15}$$

$$\eta_{12}\, D_1^{(1)} + (\eta_{22} - n_{(1)}^{-2})\, D_2^{(1)} = 0;$$

direcția vectorului $\boldsymbol{D}^{(2)}$ poate fi găsită analog, însă este mai simplu să folosim faptul că vectorii $\boldsymbol{D}^{(1)}$ și $\boldsymbol{D}^{(2)}$ sînt ortogonali între ei (vectorii proprii, care corespund valorilor proprii care nu coincid, sînt reciproc ortogonali; vezi § 19).

Fie, în particular, ca axele de coordonate X_1 și X_2 în planul frontului de undă să fie alese astfel încît $\eta_{12} = 0$ și $\eta_{11} > \eta_{22}$. Atunci indicii de refracție sînt $n_{(1)} = 1/\sqrt{\eta_{11}}$, $n_{(2)} = 1/\sqrt{\eta_{22}}$, iar vectorii inducției $\boldsymbol{D}^{(1)} \parallel X_1$, $\boldsymbol{D}^{(2)} \parallel X_2$.

În concluzie, în cristale are loc o dublă refracție a luminii: în cazul general, o radiație luminoasă monocromatică ce trece

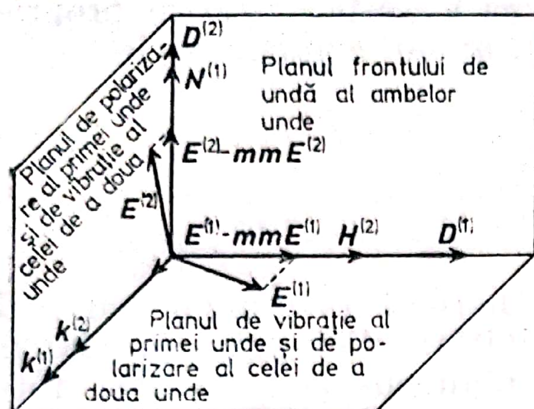


Fig. 34.2. Planurile de polarizare și planurile de vibrație ale celor două unde, din cadrul dublei refracții.

prin cristal într-o anumită direcție se descompune în două unde liniar polarizate, care se propagă cu viteze diferite, $v_{(1)}$ și $v_{(2)}$. Planurile de polarizare ale acestor două unde sînt reciproc perpendiculare (fig. 34.2).

§ 35. INDICATRICEA OPTICĂ

Calculele efectuate în § 34 se pot ilustra printr-o construcție geometrică simplă. Caracteristica tensorului impermitivitate dielectrică, $\boldsymbol{\eta}$,

$$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{r} = 1, \qquad \eta_{ik}x_i\, x_k = 1 \tag{35.1}$$

este un elipsoid cu centrul în originea axelor de coordonate, denumit *indicatricea optică* a cristalului (se poate demonstra că toate valorile proprii ale tensorului sînt pozitive).

Să examinăm o secțiune centrală a indicatricei optice cu planul frontului de undă; va fi o elipsă, ale cărei puncte satisfac, toate, simultan atît ecuația indicatricei, (35.1), cît și ecuația planului frontului de undă, care trece prin originea axelor de coordonate, $x_3 = 0$. Ecuația acestei elipse (în același sistem special de coordonate) este

$$\eta_{11}x_1^2 + 2\eta_{12}x_1x_2 + \eta_{22}x_2^2 = 1. \tag{35.2}$$

Dacă orientăm axele X_1 și X_2 ale sistemului special de coordonate după vectorii proprii ai tensorului bidimensional

$$\begin{Vmatrix} \eta_{11} & \eta_{12} \\ \eta_{12} & \eta_{22} \end{Vmatrix},$$

atunci, deoarece valorile proprii ale acestui tensor sînt egale cu $n_{(1)}^{-2}$ și $n_{(2)}^{-2}$, ecuația elipsei capătă forma

$$\left(\frac{x_1}{n_{(1)}}\right)^2 + \left(\frac{x_2}{n_{(2)}}\right)^2 = 1. \qquad (35.3)$$

De aici rezultă clar că $n_{(1)}$ şi $n_{(2)}$ sînt lungimile semiaxelor principale ale elipsei. După aceleaşi semiaxe vor fi orientaţi şi vectorii inducţie electrică, $\boldsymbol{D}^{(1)}$ şi $\boldsymbol{D}^{(2)}$.

Prin urmare, pentru a stabili viteza şi polarizarea undelor electromagnetice, care se propagă într-un cristal după orice direcţie dată, este suficient să se studieze secţiunea centrală a indicatricei optice cu planul frontului de undă, adică cu planul normal la direcţia de propagare a undei. Direcţiile semiaxelor principale ale acestei secţiuni coincid cu direcţiile vectorilor inducţie electrică ai undei respective, lungimile acestor semiaxe principale fiind egale cu indicii lor de refracţie.

O schemă a unei indicatrice optice este reprezentată în figura 35.1. S este secţiunea centrală, normală la direcţia de propagare a undei, iar $\boldsymbol{m}$, vectorul normalei undei. Semiaxele elipsei sînt egale ca mărime cu $n_{(1)}$ şi $n_{(2)}$. Pentru undele cu indicele de refracţie $n_{(1)}$ planul de oscilaţie a vectorului $\boldsymbol{D}^{(1)}$ trece prin $\boldsymbol{D}^{(2)}$ şi $\boldsymbol{m}$, iar pentru unda cu $n_{(2)}$, prin $\boldsymbol{D}^{(2)}$ şi $\boldsymbol{m}$.

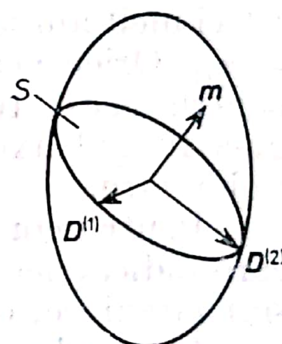


Fig. 35.1. O secţiune centrală a indicatricei optice a unui cristal uniax cu planul frontului de undă.

Astfel, pentru determinarea vitezei, a indicelui de refracţie şi a planului de vibraţie, pentru undele ce se propagă printr-un cristal după orice direcţie, este necesar să se cunoască mărimile semiaxelor indicatricei optice, forma şi orientarea ei în cristal.

Mărimile absolute ale semiaxelor indicatricei optice, N_1, N_2, N_3 (cu n notăm indicile de refracţie într-o direcţie arbitrară, iar cu N, indicii de refracţie în direcţiile axelor principale sau indicii de refracţie principali) sînt parametri caracteristici ai unei substanţe. Reamintim că ele depind de frecvenţa de oscilaţie a cîmpului electromagnetic (cît şi de mărimea unor factori exteriori, cum ar fi temperatura, cîmpul electric, tensiunile mecanice etc.; vezi capitolul 9). În ceea ce priveşte forma şi orientarea indicatricei, aceasta este complet determinată de simetria cristalului

Categoria cristalului	Valoarea lui N	Forma indicatricei optice	Proprietăţile optice ale cristalului
Superioară	$N_{(1)} = N_{(2)} = N_{(3)}$	Sferă	Izotrope
Medie	$N_{(1)} = N_{(2)} \neq N_{(3)}$	Elipsoid de rotaţie	Uniaxe
Inferioară	$N_{(1)} \neq N_{(2)} \neq N_{(3)}$	Elipsoid cu trei axe	Biaxe

În cristalele din categoria superioară, indicatricea optică este o sferă cu raza $N = 1/\sqrt{\eta}$. Toate secțiunile centrale sînt cercuri, toți indicii de refracție sînt egali între ei, nu există dublă refracție. Relativ la proprietățile optice, cristalele din categoria superioară sînt izotrope.

În cristalele din categoriile medie și inferioară, lumina monocromatică trecînd după orice direcție se descompune, în general, în două unde plan polarizate. În toate aceste cristale există totuși direcții particulare — *axele optice* sau *binormalele* — care sînt, caracterizate prin faptul că secțiunea indicatricei, normală la ele, cu frontul de undă este un cerc. Pentru orice alegere a axelor X_1 și X_2 într-un plan al frontului de undă, perpendicular pe axa optică, proiecția tensorului impermitivității dielectrice, pe acest plan, are componentele,

$$\begin{Vmatrix} \eta_{11} & 0 \\ 0 & \eta_{11} \end{Vmatrix}$$

astfel încît ambele rădăcini ale ecuației (34.13) coincid : $n_{(1)}^{-2} = n_{(2)}^{-2} = \eta_{11}$. Orice vector care se află în planul frontului de undă va fi, pentru acest tensor vector propriu al său. Din această cauză de-a lungul axei optice se poate propaga lumină de orice fel de polarizare.

Pentru corpurile izotrope și cristalele sistemului cubic, pentru care indicatricea optică este o sferă și deci toate secțiunile centrale sînt circulare, orice direcție poate fi considerată axă optică.

În cazul cristalelor din categoria medie, indicatricea optică este un elipsoid de rotație descris de ecuația (în sistemul de coordonate cristalofizic)

$$\frac{x_1^2 + x_2^2}{N_o^2} + \frac{x_3^2}{N_e^2} = 1. \tag{35.4}$$

Axa de rotație a elipsoidului coincide cu axa principală de simetrie a cristalului, iar singura lui secțiune circulară, care este perpendiculară pe axa principală de simetrie a cristalului, are raza N_0. Axa principală de simetrie este unica axă optică. Cristalele din categoria medie sînt uniaxe din punct de vedere optic. Binormala indicatricei optice coincide cu axa principală de simetrie a cristalului.

În cazul cristalelor din categoria inferioară, indicatricea optică este un elipsoid de formă generală ; într-un sistem de coordonate construit pe vectorii proprii ai tensorilor dielectrici pentru frecvența dată (acest sistem de coordonate coincide cu sistemul cristalofizic, numai în cazul cristalelor rombice ; în cazul cristalelor monoclinice, sistemul are o singură axă comună cu siste-

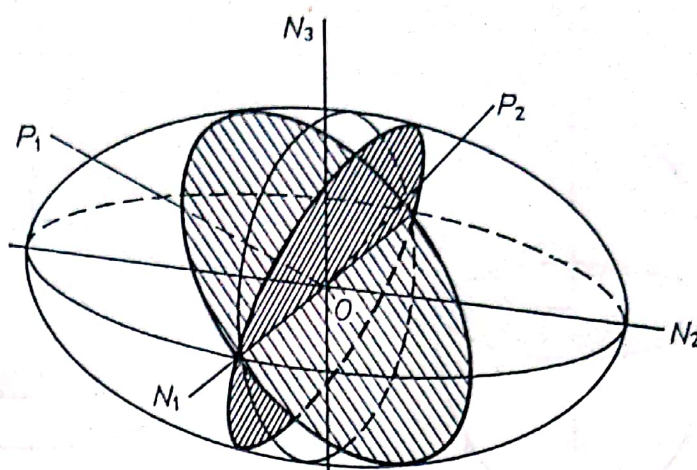


Fig. 35.2. O secţiune centrală a indicatricei optice a unui cristal biax.

mul de coordonate cristalofizic), ecuaţia ei va fi

$$\left(\frac{x_1}{N_1}\right)^2+\left(\frac{x_2}{N_2}\right)^2+\left(\frac{x_3}{N_3}\right)^2=1. \qquad (35.5)$$

Aici N_1, N_2, N_3 sînt indicii principali de refracţie: inversele pătratelor lor sînt egale cu valorile proprii ale tensorului impermitivităţii dielectrice. Aceste indicatrice au două secţiuni circulare şi, corespunzător, două binormale, adică au două axe optice, P_1 şi P_2 (fig. 35.2): cristalele din categoria inferioară sînt biaxe din punct de vedere optic. Ecuaţia (35.1) şi interpretarea ei geometrică sub formă de indicatrice optică permit să se caracterizeze intuitiv proprietăţile optice ale cristalelor.

În cristalele din categoria medie orientarea axei optice este complet determinată de simetria cristalului: axă optică (binormală) este totdeauna direcţia [001] sau [0001], adică axa principală de simetrie a cristalului, planul bazei, (001) sau (0001), fiind o secţiune optic izotropă.

Din (35.4) rezultă că în cristalele optic uniaxe, unul dintre indicii de refracţie, $n_{(1)}$, nu depinde de direcţie, precum cel de al doilea, $n_{(2)}$, este diferit după direcţii diferite. Primul dintre ei se numeşte de obicei indice de refracţie „ordinar" şi se notează n_0 (sau N_0). Al doilea se numeşte „extraordinar" şi se notează n_e. Valorile lui variază în funcţie de direcţia de propagare a undei, de la N_0 pînă la valoarea extremă, N_e. Prin urmare, $n_0 = N_0$ iar n_e variază de la N_0 pînă la N_e.

Denumirile de „ordinar" şi „extraordinar" îşi au originea, în faptul că unda cu indicele de refracţie n_0 coincide cu normala undei ca şi în cazul undelor obişnuite în mediile izotrope, pe cînd, în cazul undei cu indicele de refracţie n_e unda se abate de la normala undei (vezi § 36).

Diferenţa $\Delta N = N_e - N_0$ măsoară dubla refracţie a unui cristal. Dacă $(N_e - N_0) > 0$, cristalele aniaxe se consideră pozitive; indicatricea optică are forma unui elipsoid de rotaţie alun-

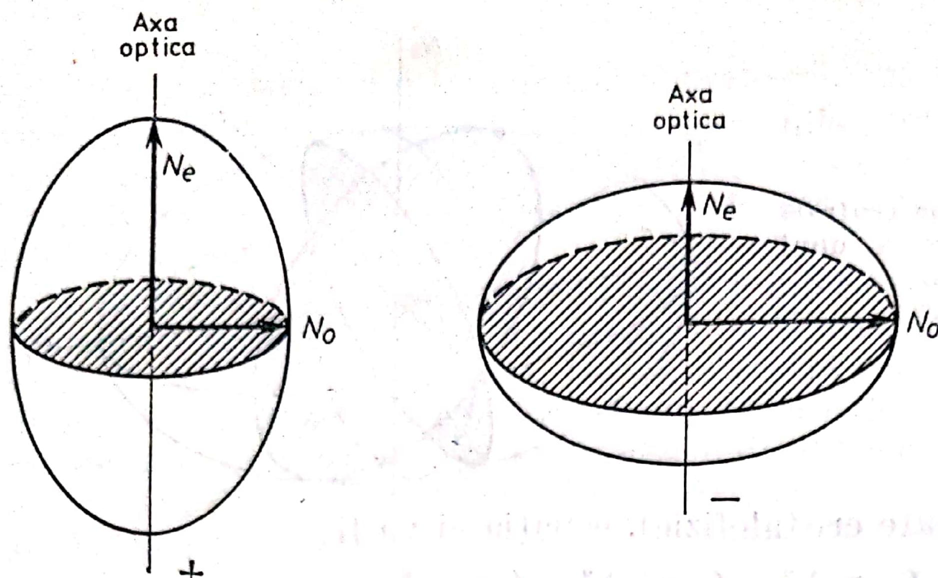


Fig. 35.3. Indicatricele optice ale cristalelor uniaxe pozitive și negative.

git după axa optică. Dacă $(N_e - N_0) < 0$, forma indicatricei optice este un elipsoid de rotație turtit, iar cristalele sînt optic negative (fig. 35.3). Un exemplu de cristale uniaxe pozitive îl constituie cuarțul iar de cristale uniaxe negative calcitul, KDP. O varietate transparentă de calcit — spatul de Islanda — este un exemplu clasic de cristal birefringent; tocmai la acest cristal, în 1669, Erasmus Bartolinus a descris fenomenul de dublă refracție. Turtirea sau alungirea elipsoizilor din figura 35.3 este mult exagerată. Numai pentru cristale cu o dublă refringență foarte mare, cum ar fi calcitul, silitra, rutilul, diferența dintre N_e și N_0 ajunge pînă la aproximativ 10%. O dublă refracție exraordinară o au seleniul și telurul în domeniul infraroșu al spectrului. Pentru majoritatea cristalelor însă diferența dintre N_e și N_0 nu depășește fracțiuni de procente (tabelul 35.1).

Tabelul 35.1

Indicii de refracție și birefringența cristalelor

Cristalul	N_0	N_e	ΔN	λ, μm
Cuarț	1,54424	1,55335	0,009	0,589
Calcit	1,65835	1,48640	0,1719	0,589
Rubin	1,768	1,759	0,008	0,589
Silitră	1,5848	1,3360	0,249	0,589
Rutil	2,62	2,90	0,28	0,589
ADP	1,52478	1,47939	0,045	0,589
KDP	1,50977	1,46856	0,04	0,589
Cristalul	N_1	N_2	N_3	λ_2 μm
Sulf	1,9576	2,0379	2,2454	0,589
Topaz	1,627	1,620	1,619	0,589
Mică (muscovit)	1,594	1,590	1,561	0,589
Gips	1,530	1,523	1,520	0,589
Sare Seignette	1,495	1,492	1,490	0,589

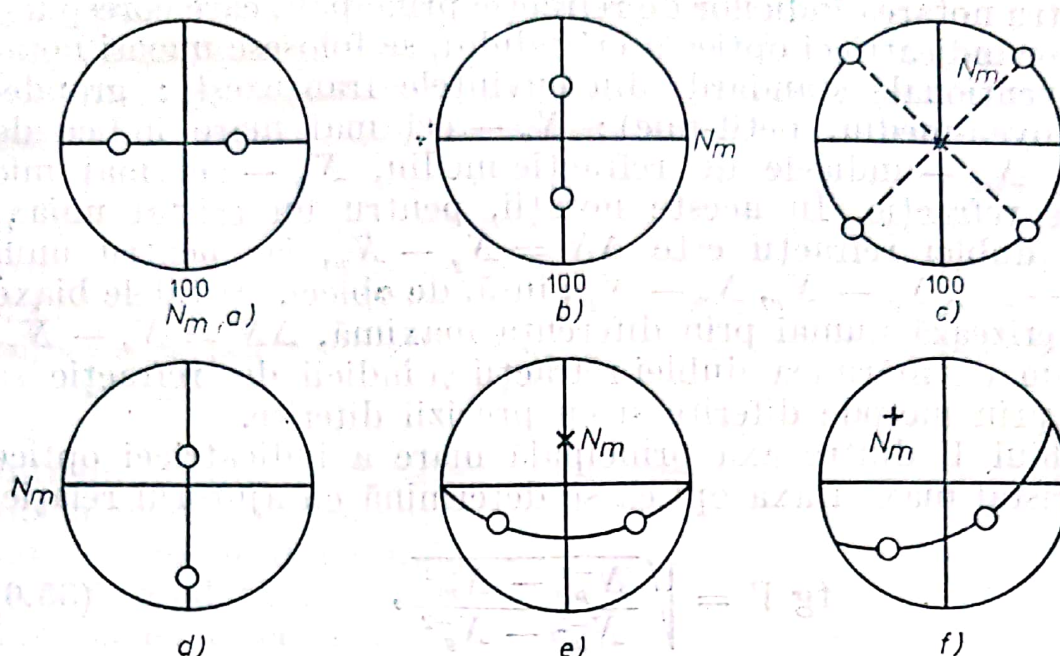


Fig. 35.4. Proiecţiile stereografice ale axelor indicatricei şi ale planurilor axelor optice în cristalele biaxe : *a*), *b*), *c*) rombice, *d*), *e*) monoclinice, *f*) triclinice.

În cristalele din categoria inferioară, ambii indici de refracţie sînt „extraordinari", adică mărimea lor depinde de direcţie, iar raza incidentă şi raza refractată nu se află în acelaşi plan. Cristalele sînt optic biaxe. Indicatricea optică are două secţiuni circulare. Linia de intersecţie a secţiunilor circulare este axa principală medie a indicatricei optice; ea este perpendiculară pe planul axelor optice. Axa principală mare şi cea mică ale indicatricei optice sînt bisectoare ale unghiurilor dintre axele optice. Simetria indicatricei optice este *mmm*.

În cristalele sistemului rombic, axele principale ale indicatricei optice coincid cu axele cristalografice, adică cu axele 2 sau cu normalele la planul *m*, iar planul axelor optice cu planurile (100), (001) sau (010).

În cristalele monoclinice una dintre axele indicatricei trece totdeauna de-a lungul axei 2 sau după normala la *m*, adică coincide cu axa X_2, iar direcţiile celorlalte două axe, conţinute în planul (010), nu depind de simetria cristalului. Planul axelor optice este fie paralel cu unicul plan de simetrie, fie cuprins în planul zonei în care se află axa X_2.

În sfîrşit, în cristalele triclinice, în general, orientarea indicatricei nu este legată în nici un fel de simetria cristalului, fiind necesar să o determinăm pentru fiecare substanţă.

Proiecţiile stereografice ale axelor optice şi ale axelor principale ale indicatricei cristalelor din categoria inferioară sînt reprezentate în figura 35.4.

Pentru notarea indicilor de refracţie principali, care corespund semiaxelor indicatricei optice a cristalului, se folosesc uneori notaţiile convenţionale standard (din cuvintele franţuzeşti : grande-mare, moyen-mediu, petit-mic) : N_g — cel mai mare indice de refracţie, N_m — indicele de refracţie mediu, N_p — cel mai mic indice de refracţie. În aceste notaţii, pentru un cristal uniax, mărimea dublei refracţii este $\Delta N = N_g - N_p$, iar pentru unul biax $N_g - N_m$, $N_g - N_p$, $N_m - N_p$; însă, de obicei, cristalele biaxe se caracterizează numai prin diferenţa maximă, $\Delta N = N_g - N_p$. Menţionăm că mărimea dublei refracţii şi indicii de refracţie se măsoară prin metode diferite şi cu precizii diferite.

Unghiul V dintre axa principală mare a indicatricei optice a unui cristal biax şi axa optică se determină cu ajutorul relaţiei

$$\operatorname{tg} V = \sqrt{\frac{N_p^{-2} - N_m^{-2}}{N_m^{-2} - N_g^{-2}}}, \qquad (35.6)$$

unghiul dintre axele optice fiind egal cu $2V$. Cristalul biax se consideră, de obicei, *optic pozitiv*, dacă $2V < 90°$, axa principală mare a indicatricei fiind bisectoare a unui unghi ascuţit, iar cea mică a unui unghi obtuz ; un cristal biax se consideră *optic negativ* dacă $2V > 90°$, axa principală mare a indicatricei este bisectoare a unghiului obtuz, iar cea mică a unghiului ascuţit. După cum indicele de refracţie mediu, N_m, este apropiat de valoarea cea mai mare, N_g, sau de cea mai mică N_p, unghiul V este aproape de 0 sau de 90°, cristalul apropiindu-se după proprietăţile lui optice de cristalele uniaxe pozitive, sau respectiv, de cele negative. Din contra, dacă indicele de refracţie mediu, N_m, satisface egalitatea

$$2N_m^{-2} = N_p^{-2} + N_g^{-2},$$

axele optice sînt reciproc perpendiculare ($V = 45°$), cristalul nu este nici pozitiv nici negativ şi din punct de vedere al proprietăţilor lui optice este cel mai îndepărtat de un cristal uniax.

Subliniem că toate aceste definiţii au sens numai în cazul unei anumite lungimi de undă a luminii date şi pentru o temperatură bine determinată. Datorită dispersiei luminii, sînt posibile cazuri în care o aceeaşi substanţă este optic pozitivă pentru o anumită lungime de undă şi optic negativă, pentru altă lungime de undă (vezi mai jos, § 39).

Deci, pentru caracterizarea deplină a proprietăţilor optice ale cristalelor trebuie măsurate următoarele mărimi :

— pentru cristalele din categoria superioară — N ;

— pentru cristalele din categoria medie — N_g, N_p, semnul optic ;

— pentru cristalele din categoria inferioară — N_g, N_m, N_p.

În afară de aceasta, pentru cristalele din categoria inferioară este necesar să se determine orientarea axelor principale ale indicatricei optice și direcțiile binormalelor.

În încheiere, vom sublinia încă o dată profunda deosebire dintre caracterul propagării undelor electromagnetice în mediile izotrope și caracterul propagării undelor electromagnetice în mediile anizotrope. Într-un mediu izotrop transparent în fiecare direcție se pot propaga unde luminoase de orice polarizare, ceea ce înseamnă că se poate propaga și un amestec de unde luminoase cu toate polarizările posibile — lumina naturală. Din contră într-un mediu transparent anizotrop, după o anumită direcție (dacă aceasta nu este axa optică) se pot propaga numai unde luminoase care au numai două polarizări diferite, riguros determinate, avînd totodată vitezele diferite, lumina naturală (adică, în fond, lumină cu orice polarizare) putîndu-se propaga însă numai de-a lungul axelor optice.

Așa cum se va arăta în continuare, diferența în simetrie a cristalelor determină deosebiri în caracterul polarizării luminii care se propagă prin ele: pentru cristalele centrosimetrice este caracteristică polarizarea liniară pe cînd pentru cele necentrosimetrice — polarizarea eliptică și circulară.

Acest mod deosebit de propagare a luminii prin cristale nu este legat nici de proprietățile specifice ale undelor electromagnetice nici de structura internă a cristalelor, ci numai de anizotropia lor. Undele elastice care se propagă într-un mediu anizotrop sînt, de asemenea, polarizate într-un mod strict determinat (vezi § 56).

§ 36. UNDE ȘI RAZE. PRINCIPIUL DUALITĂȚII. ELIPSOIDUL FRESNEL

Vectorul flux de energie (vectorul Poynting), dintr-o undă electromagnetică, este egal, după cum se știe, cu

$$\boldsymbol{S} = \frac{c}{4\pi}\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H}; \qquad (36.1)$$

vectorul unitar al acestei direcții, $\boldsymbol{s}$, se numește *vectorul rază*. Dacă în drumul undei luminoase, într-un cristal transparent, se interpune un ecran opac cu o diafragmă suficient de îngustă (lărgimea diafragmei trebuind să fie de cîteva ori mai mare decît lungimea de undă), atunci direcția razei ce trece prin diafragmă se determină tocmai cu ajutorul vectorului $\boldsymbol{s}$ (fig. 36.1).

Într-un mediu izotrop, pentru o rază ce pleacă de la o sursă punctuală de lumină, suprafaţa de undă (adică locul geometric al tuturor punctelor pînă la care unda ajunge în aceeaşi fază după timpul t) are formă sferică; direcţia razei va coincide cu normala la frontul de undă, adică la planul tangent la suprafaţa de undă în momentul t.

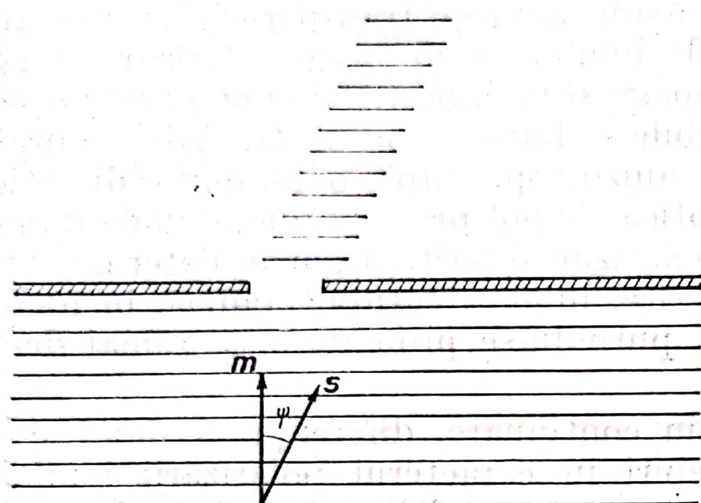


Fig. 36.1. Unda şi raza într-un mediu anizotrop.

Viteza de fază şi viteza de grup a undei, într-un mediu izotrop, pot fi diferite ca mărime, însă coincid ca direcţie. *Viteza de fază* sau *viteza normală* a undei, $\boldsymbol{v}$, este viteza de deplasare a frontului de undă, orientată după normala la frontul de undă. *Viteza de grup* sau *viteza radială* a undei, $\boldsymbol{u}$, este viteza radiaţiei, adică viteza de transmitere a energiei, coliniară cu vectorul Poynting, $\boldsymbol{S}$. Într-un mediu izotrop vectorii $\boldsymbol{v}$ şi $\boldsymbol{u}$ sînt coliniari. Într-un mediu anizotrop ei pot fi însă şi necoliniari. Anume, dacă direcţiile vectorilor $\boldsymbol{E}$ şi $\boldsymbol{D}$ din unda electromagnetică sînt diferite, atunci sînt diferite (făcînd acelaşi unghi) şi direcţiile vectorilor $\boldsymbol{s}$ şi $\boldsymbol{m}$. Într-adevăr, din definirea vectorului Poynting, (36.1), este clar că vectorii $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{H}$ şi $\boldsymbol{s}$ ca şi $\boldsymbol{D}$, $\boldsymbol{H}$ şi $\boldsymbol{m}$ formează un triplet de vectori, drept; dacă însă $\boldsymbol{E}$ şi $\boldsymbol{D}$ nu sînt coliniari, atunci raza $\boldsymbol{s}$ şi normala la frontul de undă, $\boldsymbol{m}$, vor fi tot necoliniare, iar aceasta înseamnă că cele două triplete drepte nu coincid (vezi figura 35.1). În acest caz vitezele — cea de fază, $\boldsymbol{v}$, şi cea de grup, $\boldsymbol{u}$ — au, de asemenea, direcţii diferite, formînd între ele un unghi ψ. Viteza de grup a undei luminoase, sau acelaşi lucru, viteza razei de lumină este

$$u = v / \cos \psi = v(\boldsymbol{m} . \boldsymbol{s}).$$

Aşa că ea, fie coincide cu viteza de fază, şi ca mărime, şi ca direcţie, fie este diferită de viteza de fază ca direcţie şi o depăşeşte

în mărime. Mărimea inversă față de indicele de refracție al razei

$$q = u/c, \tag{36.2}$$

este legată de indicele de refracție, n, prin relația

$$nq = \frac{1}{\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{s}} = \frac{1}{\cos\psi}. \tag{36.3}$$

Din formula (36.1) este clar că vectorul rază este perpendicular pe vectorul intensitate a cîmpului electric și pe vectorul intensitate a cîmpului magnetic

$$\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{E} = 0, \ \boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{H} = 0. \tag{36.4}$$

Folosind aceasta, vom evalua

$$\boldsymbol{s} \times \boldsymbol{D} = -n\boldsymbol{s} \times (\boldsymbol{m} \times \boldsymbol{H}) = n(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{m}\boldsymbol{H} - \boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{H}\boldsymbol{m}) = (n\cos\psi)\,\boldsymbol{H},$$

$$\boldsymbol{s} \times \boldsymbol{H} = n\boldsymbol{s} \times (\boldsymbol{m} \times \boldsymbol{E}) = n(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{E}\boldsymbol{m} - \boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{m}\boldsymbol{E}) = -(n\cos\psi)\boldsymbol{E};$$

aceste relații sînt foarte asemănătoare cu ecuațiile Maxwell pentru unda luminoasă plană, deduse în § 34, în forma (34.9). Pentru a le face mai intuitive, le vom transforma un pic, transcriindu-le împreună cu ecuațiile (34.9) și completîndu-le cu ecuațiile de material corespunzătoare ($\varkappa$ fiind tensorul permitivității dielectrice pentru aceeași frecvență, ω):

Ecuațiile Maxwell

pentru unda luminoasă		pentru raza de lumină	
$n\boldsymbol{m} \times \boldsymbol{H} = -\boldsymbol{D},$ $n\boldsymbol{m} \times \boldsymbol{E} = \boldsymbol{H},$	(34.9)	$q\boldsymbol{s} \times \boldsymbol{H} = -\boldsymbol{E},$ $q\boldsymbol{s} \times \boldsymbol{D} = \boldsymbol{H},$	(36.5)
$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{D},$	(34.2)	$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{E}.$	(36.6)

Prin urmare, sistemul de ecuații pentru undă trece în sistemul de ecuații pentru rază dacă se fac substituțiile

$$\boldsymbol{E} \to \boldsymbol{D},\ \boldsymbol{D} \to \boldsymbol{E},\ \boldsymbol{H} \to \boldsymbol{H},\ \boldsymbol{m} \to \boldsymbol{s},\ n \to q,\ \boldsymbol{\eta} \to \boldsymbol{\varkappa}. \tag{36.7}$$

Aceasta permite ca din orice relație pentru undă să se obțină, complet formal — prin simpla substituire (36.7) — relațiile corespunzătoare pentru rază (și viceversa).

Principiul dualității afirmă că : orice relație, adevărată pentru mărimile $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{D}$, $\boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{m}$, n, $\boldsymbol{\eta}$ sau $\boldsymbol{D}$, $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{s}$, q, $\boldsymbol{\varkappa}$, rămîne adevărată în cazul înlocuirii mărimilor conform regulii (36.7).

Rolul pe care, pentru undele luminoase, îl are indicatricea optică, revine, pentru razele luminoase *elipsoidului Fresnel*

$$\boldsymbol{r}.\boldsymbol{\varkappa}.\boldsymbol{r} = 1, \qquad \varkappa_{ik}\, x_i\, x_k = 1, \tag{36.8}$$

care nu este altceva decît caracteristica tensorului permitivității dielectrice.

Pentru corpurile izotrope și cristalele sistemului cubic, elipsoidul Fresnel este o sferă cu raza $q = 1/n = 1/\sqrt{\varkappa}$.

În cazul cristalelor uniaxe, elipsoidul Fresnel este un elipsoid de rotație. În sistemul de coordonate cristalofizic ecuația sa va fi

$$N_0^2\,(x_1^2 + x_2^2) + N_e^2\, x_3^2 = 1 \tag{36.9}$$

(pătratele indicilor de refracție principali fiind inverse față de valorile tensorului $\boldsymbol{\eta}$ vor fi deci egale cu valorile proprii ale tensorului care este inversul său, $\boldsymbol{\varkappa}$). Elipsoidul de rotație are o singură secțiune circulară care este perpendiculară pe axa optică principală a cristalului.

Pentru cristalele uniaxe, optic pozitive elipsoidul Fresnel este turtit, iar pentru cele negative este alungit (fig. 36.2).

În cazul cristalelor biaxe, acest elipsoid este un elipsoid de formă generală, avînd două secțiuni circulare (fig. 36.3). În sistemul de coordonate construit pe vectorii proprii ai tensorilor electrici, ecuația sa este

$$N_1 x_1^2 + N_2^2 x_2^2 + N_3^2 x_3^2 = 1. \tag{36.10}$$

Axele principale ale indicatricei optice și ale elipsoidului Fresnel pentru o lumină monocromatică, de o aceeași frecvență, coincid totdeauna, dat fiind că tensorii reciproc inverși vor avea aceiași vectori proprii.

Pentru a explica viteza și polarizarea razei care se propagă într-un cristal după direcția $\boldsymbol{s}$, trebuie examinată secțiunea centrală a elipsoidului Fresnel, cu un plan perpendicular pe direcția razei. În general, această secțiune este o elipsă. Atunci rezultă că după o anumită direcție se propagă două raze polarizate după direcții reciproc perpendiculare cu viteze diferite, avînd normale de undă diferite. Lungimile semiaxelor principale ale elipsei, $q_{(1)}$ și $q_{(2)}$, sînt proporționale cu vitezele lor,

$$u_{(1)} = q_{(1)}\, c, \qquad u_{(2)} = q_{(2)} c, \tag{36.11}$$

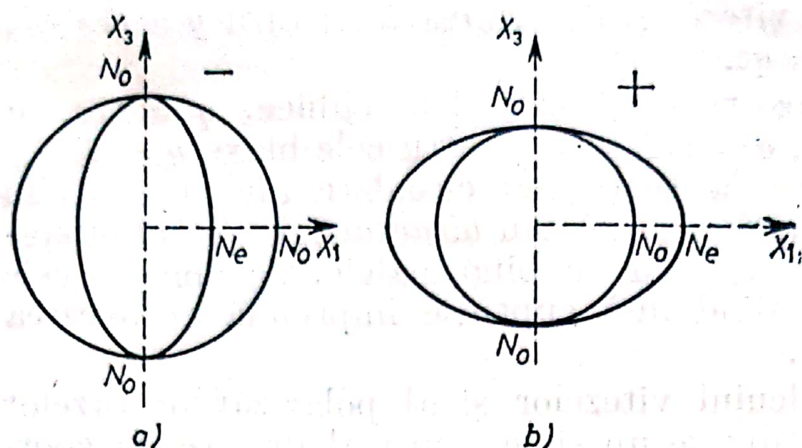


Fig. 36.2. Suprafețele indicilor de refracție ai cristalelor uniaxe: *a*) optic negative, *b*) optic pozitive.

iar direcțiile semiaxelor principale coincid cu direcțiile vectorului intensității cîmpului electric, $\boldsymbol{E}^{(1)}$ și $\boldsymbol{E}^{(2)}$. Dacă însă direcția $\boldsymbol{s}$ va fi perpendiculară pe una dintre secțiunile circulare ale elipsoidului Fresnel, atunci, în această direcție se poate propaga o rază de

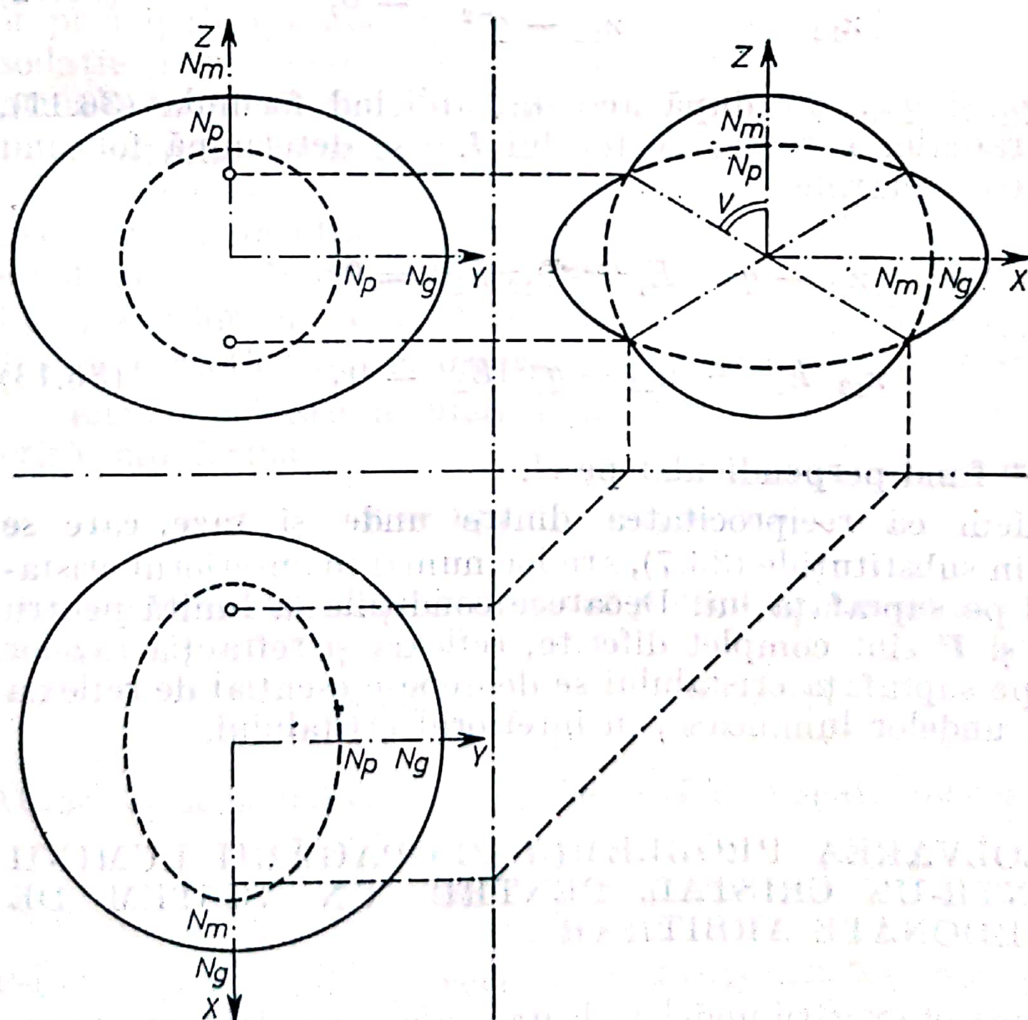


Fig. 36.3. Suprafața indicilor de refracție ai cristalelor biaxe în trei proiecții.

lumină naturală, avînd viteza u, determinată de raza q a acestei secțiuni circulare : $u = qc$.

Pentru corpurile izotrope și cristalele cubice, $q = 1/n$, în cazul cristalelor uniaxe, $q = 1/N_0$, iar pentru cele biaxe $q = 1/N_m$. Direcțiile perpendiculare la secțiunile circulare ale elipsoidului Fresnel se numesc *axe optice radiale* sau *biradiale*. În cazul cristalelor uniaxe, biradialele coincid cu binormalele, pe cînd la cele biaxe, nu mai coincid, fiind însă cuprinse împreună cu acestea în planul axelor optice.

Practic, pentru calculul vitezelor și al polarizărilor razelor este convenabil să se utilizeze un sistem special de axe de coordonate care are axa X_3 orientată după rază, iar axele X_1 și X_2 perpendiculare pe rază. Calculînd componentele necesare ale tensorului permitivității dielectrice, $\varkappa$, în acest sistem de coordonate, se pot ușor determina, din ecuația

$$\begin{vmatrix} \varkappa_{11} - q^{-2} & \varkappa_{12} \\ \varkappa_{12} & \varkappa_{22} - q^{-2} \end{vmatrix} = 0, \qquad (36.12)$$

mărimile $q_{(1)}$ și $q_{(2)}$, iar după aceasta, aplicînd formula (36.11), și vitezele radiale. Direcția vectorului $\boldsymbol{E}^{(1)}$ se determină folosind oricare dintre ecuațiile

$$(\varkappa_{11} - q_{(1)}^{-2})\, E_1^{(1)} + \varkappa_{12}\, E_2^{(1)} = 0,$$

$$\varkappa_{12}\, E_1^{(1)} + (\varkappa_{22} - q_{(1)}^{-2}) E_2^{(1)} = 0, \qquad (36.13)$$

vectorul $\boldsymbol{E}^{(2)}$ fiind perpendicular pe el.

Subliniem că reciprocitatea dintre unde și raze, care se exprimă prin substituțiile (36.7), are loc numai în interiorul cristalului, nu și pe suprafața lui. Deoarece condițiile la limită pentru vectorii $\boldsymbol{D}$ și $\boldsymbol{E}$ sînt complet diferite, reflexia și refracția razelor luminoase pe suprafața cristalului se deosebesc esențial de reflexia și refracția undelor luminoase, în interiorul cristalului.

§ 37. REZOLVAREA PROBLEMEI PROPAGĂRII LUMINII PRINTR-UN CRISTAL, PENTRU UN SISTEM DE COORDONATE ARBITRAR

Problema propagării undelor electromagnetice plane printr-un mediu anizotrop este atît de importantă, încît se impune să exami-

năm rezolvarea ei într-un sistem cartezian de coordonate complet arbitrar, nelegat în nici un fel, nici de direcţia de propagare a luminii, nici de axele principale ale indicatricei optice.

Fie $\boldsymbol{m}$ un vector unitar, normal la frontul undei electromagnetice plane, cu o frecvenţă ω, dată, iar $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta}(\omega)$ tensorul impermitivităţii dielectrice pentru această frecvenţă. În sistemul cartezian arbitrar de coordonate, ecuaţia indicatricei optice este de forma

$$\eta_{ik}\, x_i\, x_k = 1, \qquad \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{r} = 1, \tag{37.1}$$

iar ecuaţia planului ce trece prin centrul indicatricei, paralel cu frontul de undă, va fi

$$m_i x_i = 0, \qquad \boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r} = 0. \tag{37.2}$$

Secţiunea indicatricei optice cu acest plan este o elipsă; toate punctele ei satisfac ambele ecuaţii. Direcţiile şi lungimile semiaxelor principale ale acestei elipse coincid respectiv cu direcţiile de oscilaţie şi cu indicii de refracţie ai undelor electromagnetice având normala $\boldsymbol{m}$, unde care se propagă în cristalul considerat.

Lungimile semiaxelor principale ale elipsei reprezintă distanţele cele mai mari sau cele mai mici dintre punctele elipsei şi centrul ei. Rezultă că indicii de refracţie şi direcţiile de vibraţie se pot găsi rezolvînd problema stabilirii distanţelor faţă de centrul elipsei a celor mai depărtate sau celor mai apropiate puncte ale ei şi a direcţiei în care se află acestea faţă de centrul elipsei.

Raza vectoare a unui punct oarecare, $\boldsymbol{r} = x_i \boldsymbol{e}_i$, poate fi scrisă sub forma

$$\boldsymbol{r} = n\boldsymbol{p}, \qquad x_i = n\, p_i, \tag{37.3}$$

n fiind lungimea acestui vector, iar $\boldsymbol{p}$ vectorul unitar avînd aceeaşi direcţie

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p} = 1, \qquad p_i p_i = 1. \tag{37.4}$$

Atunci ecuaţia indicatricei optice, (37.1), capătă forma

$$n^2 \eta_{ik} p_i p_k = 1, \; n^2 \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p} = 1.$$

Pentru punctele elipsei, vectorul unitar $\boldsymbol{p}$ satisface ecuaţia

$$m_i\, p_i = 0, \qquad \boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{p} = 0. \tag{37.5}$$

Prin urmare, distanţa dintre orice punct al indicatricei optice şi centrul ei este egală cu

$$n = \frac{1}{\sqrt{\eta_{ik}p_i p_k}} = \frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p}}}, \tag{37.6}$$

unde $\boldsymbol{p}$ este vectorul unitar, care dă direcţia în care se află faţă de centru acest punct. Dacă însă punctul se află pe elipsă, atunci componentele p_i ale vectorului unitar $\boldsymbol{p}$ trebuie să mai satisfacă şi relaţia (37.5).

Funcţia $n^{-2}(\boldsymbol{p})$ atinge valorile extreme pentru aceleaşi valori p_i, ca şi funcţia $n(\boldsymbol{p})$, fiind însă mult mai comodă pentru studiu decît aceasta din urmă. Astfel, problema s-a redus la următoarea: pentru ce valori ale lui p_i sînt atinse şi cu cît sînt egale valorile extreme ale funcţiei

$$\frac{1}{n^2(p_1, p_2, p_3)} = \eta_{ik}p_i\, p_k, \tag{37.7}$$

cu condiţiile suplimentare

$$\Phi_1(p_1, p_2, p_3,) = p_i p_i - 1 = 0,$$

$$\Phi_2(p_1, p_2, p_3) = m_i p_i = 0.$$

Pentru rezolvarea acestei probleme vom utiliza metoda multiplicatorilor Lagrange nedeterminaţi. Să formăm funcţia

$$F(p_1, p_2, p_3) = \frac{1}{2}\frac{1}{n^2} - \frac{1}{2}\lambda\Phi_1 + \mu\Phi_2 =$$

$$= \frac{1}{2}\eta_{ik}p_i p_k - \frac{1}{2}\lambda(p_i p_i - 1) + \mu\, m_i p_i, \tag{37.8}$$

în care λ şi μ sînt multiplicatorii Lagrange. Vectorii $\boldsymbol{p}^{(q)}$ „bănuiţi a avea un extrem" şi valorile $\lambda_{(q)}$ şi $\mu_{(q)}$, care le corespund, se vor determina din sistemul format de ecuaţiile

$$\frac{\partial F}{\partial p_i} = \eta_{ik}p_k - \lambda p_i + \mu m_i = 0, \tag{37.9}$$

$$\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{p}} = \boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p} - \lambda\boldsymbol{p} + \mu\boldsymbol{m} = 0,$$

precum şi din ecuaţiile (37.4) şi (37.5). Ecuaţiile (37.9) împreună cu ecuaţia (37.5) formează un sistem de ecuaţii liniare omogene în raport cu necunoscutele p_1, p_2, p_3, μ :

$$\left.\begin{aligned} (\eta_{11}-\lambda)=p_1+\eta_{12}p_2+\eta_{12}p_3+m_1\mu&=0,\\ \eta_{21}p_1+(\eta_{22}-\lambda)p_2+\eta_{23}p_3+m_2\mu&=0,\\ \eta_{31}p_1+\eta_{22}p_2+(\eta_{33}-\lambda)p_3+m_3\mu&=0,\\ m_1p_1+m_2p_2+m_3p_3&=0. \end{aligned}\right\} \qquad (37.10)$$

După cum se ştie, un sistem de ecuaţii liniare omogene are soluţii nebanale, adică ce nu sînt identic egale cu zero, în cazul, şi numai în cazul, în care determinantul acestui sistem este egal cu zero

$$\begin{vmatrix} \eta_{11}-\lambda & \eta_{12} & \eta_{13} & m_1\\ \eta_{21} & \eta_{22}-\lambda & \eta_{23} & m_2\\ \eta_{31} & \eta_{32} & \eta_{33}-\lambda & m_3\\ m_1 & m_2 & m_3 & 0 \end{vmatrix}=0. \qquad (37.11)$$

Condiţia (37.11) reprezintă o ecuaţie pătratică în raport cu multiplicatorul Lagrange, λ. Se poate arăta uşor că rădăcinile ei, $\lambda_{(1)}$ şi $\lambda_{(2)}$ sînt reale (vezi formula (37.18)). Înlocuind una dintre rădăcini de exemplu, $\lambda_{(1)}$, în sistemul (37.10), găsim valorile componentelor care corespund vectorului $\boldsymbol{p}^{(1)}$ şi multiplicatorului Lagrange $\mu_{(1)}$ cu precizie de pînă la normare, adică valorile $\alpha p_1^{(1)}$, $\alpha p_2^{(1)}$, $\alpha p_3^{(1)}$ şi $\alpha\mu$. Coeficientul necunoscut, α, se va determina din condiţiile (37.4), iar după aceasta vectorul $\boldsymbol{p}^{(1)}$ şi multiplicatorul Lagrange $\mu_{(1)}$vor fi determinaţi cu o precizie de pînă la semn, numai dacă $\lambda_{(1)} \neq \lambda_{(2)}$. Această precizie este complet suficientă deoarece centrul elipsei este pentru ea şi centrul de simetrie şi deci $n(-\boldsymbol{p}) = n(\boldsymbol{p})$.

Să examinăm unele proprietăţi generale ale soluţiilor acestei probleme. Înmulţind scalar ambii membri ai ecuaţiei (37.9) cu vectorul $\boldsymbol{p}^{(q)}$, unde $q = 1, 2$, obţinem

$$\lambda_{(q)} = \boldsymbol{p}^{(q)}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p}^{(q)}. \qquad (37.12)$$

Prin urmare, multiplicatorul Lagrange $\lambda_{(q)}$ este egal cu componenta normală a tensorului impermitivităţii dielectrice în direcţia de oscilaţie. Din formula (37.7) rezultă că el este pur şi simplu inversul pătratului indicelui de refracţie a undei luminoase care

are o anumită direcţie de vibraţie

$$\lambda_{(q)} = n_{(q)}^{-2}. \qquad (37.13)$$

Înmulţind scalar ambele părţi ale ecuaţiei (37.9) cu vectorul $\boldsymbol{m}$, obţinem

$$\mu_{(q)} = -\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p}^{(q)}, \qquad (37.14)$$

Astfel, multiplicatorul Lagrange $\mu_{(q)}$ este egal cu componenta tangenţială luată cu semn schimbat a tensorului impermitivităţii dielectrice după direcţia de vibraţie $\boldsymbol{p}$ şi după direcţia normalei undei $\boldsymbol{m}$. Deoarece componentele tangenţiale ale unui tensor izotrop sînt egale cu zero, multiplicatorul Lagrange $\mu_{(q)}$ este diferit de zero numai în cristalele optic anizotrope. Fiindcă vectorul unitar al direcţiei de oscilaţie, $\boldsymbol{p}^{(q)}$, este coliniar cu vectorul inducţie, $\boldsymbol{D}^{(q)}$, al undei electromagnetice, care are normala $\boldsymbol{m}$ şi viteza $c/n_{(q)}$ vectorul $\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p}^{(q)}$ va fi coliniar cu vectorul intensitate a cîmpului electric, $\boldsymbol{E}^{(q)}$, al acestei unde. Factorul $\mu_{(q)}$ (luat cu semn invers) este egal cu proiecţia vectorului $\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p}^{(q)}$ pe direcţia normalei undei. Prin urmare, el arată în ce măsură vectorul intensitate a cîmpului electric al undei luminoase date se abate de la planul frontului de undă. Această abatere se poate produce numai în cazul propagării luminii într-un mediu optic anizotrop.

Ecuaţiile (37.10) şi (37.11) se simplifică întrucîtva în sistemul de coordonate construit pe vectorii proprii ai tensorului impermitivităţii dielectrice, $\boldsymbol{\eta}$. În acest sistem de coordonate ecuaţia (37.11) capătă forma

$$\lambda^2 - (\eta_{(2)} + \eta_{(3)})m_1^2 + (\eta_{(3)} + \eta_{(1)})m_2^2 + (\eta_{(1)} + \eta_{(2)})m_3^2]\,\lambda +$$

$$+ [\eta_{(2)}\,\eta_{(3)}\,m_1^2 + \eta_{(3)}\,\eta_{(1)}m_2^2 + \eta_{(1)}\,\eta_{(2)}\,m_3^2] = 0. \qquad (37.15)$$

Calculînd rădăcinile acestei ecuaţii pătratice, $\lambda_{(1)}$ şi $\lambda_{(2)}$, găsim vectorii direcţiilor de vibraţie, $\boldsymbol{p}^{(1)}$ şi $\boldsymbol{p}^{(2)}$, iar dacă este necesar, multiplicatorii Lagrange $\mu_{(1)}$ şi $\mu_{(2)}$ din ecuaţiile (37.10), care, în sistemul propriu tensorului $\boldsymbol{\eta}$, capătă forma

$$\left.\begin{aligned}(\eta_{(1)} - \lambda_{(q)})p_1^{(q)} + m_1\mu_{(q)} &= 0,\\ (\eta_{(2)} - \lambda_{(q)})p_2^{(q)} + m_2\mu_{(q)} &= 0,\\ (\eta_{(3)} - \lambda_{(q)})\,p_3^{(q)} + m_3\,\mu_{(q)} &= 0,\\ m_1p_1^{(q)} + m_2p_2^{(q)} + m_3p_3^{(q)} &= 0\\ (q = 1{,}2).\end{aligned}\right\} \qquad (37.16)$$

O simplificare mult mai substanţială a ecuaţiilor (37.10) şi (37.11) se poate realiza însă scriind aceste ecuaţii într-un sistem de coordonate care are una dintre axe, axa X_3, orientată după vectorul normalei undei, $\boldsymbol{m}$. În acest sistem de coordonate, $m_1 = m_2 = 0$, $m_3 = 1$, fiind diferite de zero numai componentele p_1 şi p_2 ale vectorului direcţie de oscilaţie. Din cele patru ecuaţii (37.10) rămîn, de fapt, numai două

$$(\eta_{11} - \lambda)\, p_1 + \eta_{12} p_2 = 0\,,$$

$$\eta_{21} p_1 + (\eta_{22} - \lambda) p_2 = 0. \qquad (37.17)$$

Determinantul acestui sistem de ecuaţii liniare omogene este egal cu zero numai în cazul în care

$$\lambda_{(1,2)} = \frac{1}{2}\left[(\eta_{11} + \eta_{22}) \pm \sqrt{(\eta_{11} - \eta_{22})^2 + (2\eta_{12})^2}\right]. \qquad (37.18)$$

Substituind în ecuaţia (37.17) pe $\lambda_{(1)}$, găsim componentele vectorului $\boldsymbol{p}^{(1)}$. După aceasta, cu ajutorul celei de a treia dintre ecuaţiile (37.10) putem găsi,

$$\mu_1 = -\eta_{31} p_1^{(1)} - \eta_{32} p_2^{(1)}. \qquad (37.19)$$

Vectorul $\boldsymbol{p}^{(2)}$ şi multiplicatorul Lagrange $\mu_{(2)}$ se determină analog.

§ 38. ECUAŢIA FRESNEL. SUPRAFAŢA DE UNDĂ ŞI SUPRAFAŢA DE RADIAŢIE

În § 37 s-a arătat că într-un sistem de axe de coordonate arbitrar, în particular, într-un sistem cristalofizic, ecuaţia (37.11), pentru determinarea indicilor de refracţie ai undei care se propagă după direcţia $\boldsymbol{m}$, are forma

$$\begin{vmatrix} \eta_{11} - n^{-2} & \eta_{12} & \eta_{13} & m_1 \\ \eta_{21} & \eta_{22} - n^{-2} & \eta_{23} & m_2 \\ \eta_{31} & \eta_{32} & \eta_{33} - n^{-2} & m_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 & 0 \end{vmatrix} = 0. \qquad (38.1)$$

Aici n este indicele de refracţie, m_1, m_2, m_3 fiind componentele vectorului unitar al normalei undei, $\boldsymbol{m}$. În sistemul de coordo-

nate construit pe vectorii proprii ai tensorilor dielectrici, această ecuaţie (după înmulţirea cu $n^4 N_1^2 N_2^2 N_3^2$, a ambelor ei părţi) se scrie în forma

$$n^4 (N_1^2 m_1^2 + N_2^2 m_2^2 + N_3^2 m_3^2) - n^2[N_1^2 (N_2^2 + N_3^2) m_1^2 + \\ + N_2^2 (N_3^2 + N_1^2) m_2^2 + N_3^2 (N_1^2 + N_3^2) m_3^2] + N_1^2 N_2^2 N_3^2 = 0 \quad (38.2)$$

şi se numeşte *ecuaţia Fresnel*. Ea defineşte indicele de refracţie, n, ca funcţie de vectorul unitar al normalei undei, $\boldsymbol{m}$.

Dacă plasăm din originea axelor de coordonate după toate direcţiile segmente de lungime $n(\boldsymbol{m})$, se obţine o suprafaţă cu două pînze (deoarece aproape fiecăruia dintre vectorii $\boldsymbol{m}$ îi corespund două valori n) a indicilor de refracţie. Ecuaţia ei în coordonate polare se obţine din ecuaţia Fresnel, (38.2), aplicînd substituţiile

$$m_1 = \cos\varphi \sin\theta, \; m_2 = \sin\varphi \sin\theta, \; m_3 = \cos\theta, \quad (38.3)$$

iar într-un sistem cartezian, folosind substituţiile

$$nm_1 = x_1, \; nm_2 = x_2, \; nm_3 = x_3, \; n^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2. \quad (38.4)$$

Această suprafaţă se mai numeşte *suprafaţa vectorilor de undă*: dacă dintr-un punct se duc vectorii de undă ai tuturor undelor luminoase de o anumită frecvenţă care se propagă din cristal, atunci vîrfurile lor formează o suprafaţă, care este asemenea cu suprafaţa indicilor de refracţie, deoarece lungimile vectorilor de undă sînt proporţionale cu indicii de refracţie ai undelor corespunzătoare.

Pentru mediile optic izotrope această suprafaţă este o sferă.

Pentru cristalele uniaxe ecuaţia Fresnel (38.2) se reduce la forma

$$(n^2 - N_o^2) \{n^2 [N_o^2 (m_1^2 + m_2^2) + N_o^2 m_3^2] + N_0^2 N_e^2\} = 0. \quad (38.5)$$

Folosind substituţiile (38.4), deducem din ea ecuaţia suprafeţei indicilor de refracţie pentru cristalele uniaxe

$$(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - N_o^2)[N_o^2 (x_1^2 + x_2^2) + N_e^2 x_3^2 - N_o^2 N_e^2] = 0. \quad (38.6)$$

Aceasta este o suprafaţă dublă, care se descompune într-o sferă,

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = N_o^2,$$

şi un elipsoid de rotaţie,

$$\frac{x_1^2 + x_2^2}{N_e^2} + \frac{x_3^2}{N_o^2} = 1.$$

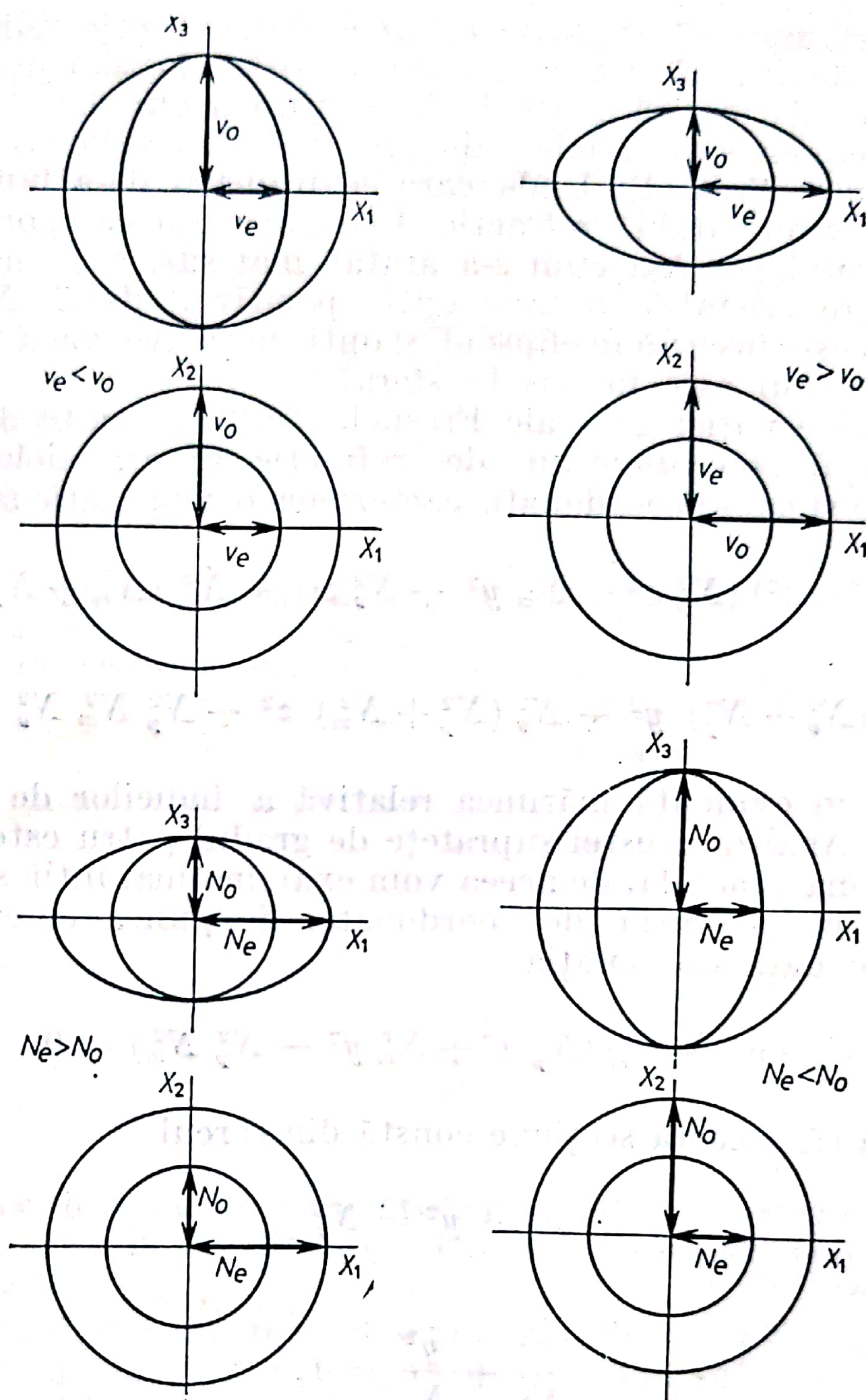


Fig. 38.1. Secţiunile suprafeţei indicilor de refracţie şi ale suprafeţei vitezelor de undă pentru cristalele uniaxe.

Evident, în cristalele categoriei medii unda luminoasă se descompune în două părţi : unda ordinară, pentru care viteza şi indicele de refracţie $n_0 = N_o$ nu depind de direcţie, şi unda extraordinară, pentru care indicii de refracţie n_e sînt diferiţi după direcţii diferite (fig. 38.1).

Sfera şi elipsoidul se ating între ele în două puncte care determină direcţia axei optice, ce coincide cu axa principală de sime-

trie a cristalului. Reamintim că în cristalele optic uniaxe, axa principală de simetrie este axă optică a cristalului şi, concomitent, atît binormală (adică normală la secţiunea circulară a indicatricei optice) cît şi biradială (adică normală la secţiunea circulară a elipsoidului Fresnel). Unda care se propagă de-a lungul axei optice nu suferă dublă refracţie. Cristalele din categoria medie sînt optic uniaxe. Aşa cum s-a arătat mai sus, s-a convenit să se considere cristalele uniaxe optic pozitive, dacă $N_e > N_o$, adică sfera este înscrisă în elipsoid, şi optic negative, dacă $N_e < N_o$, adică elipsoidul este înscris în sferă.

Studiul ecuaţiei generale Fresnel, (38.2), permite deducerea formei suprafeţei indicelui de refracţie al cristalelor biaxe. Ecuaţia acesteia, în coordonate carteziene o vom scrie sub forma

$$(x^2+y^2+z^2)\,(N_p^2\,x^2+N_m^2\,y^2+N_g^2\,z^2)-N_p^2\,(N_m^2+N_g^2)x^2- \tag{38.7}$$

$$-N_m^2\,(N_g^2+N_p^2)\;y^2-N_g^2\,(N_p^2+N_m^2)\;z^2+N_p^2\,N_m^2\,N_g^2=0$$

care pune în evidenţă mărimea relativă a indicilor de refracţie principali. Analiza acestei suprafeţe de gradul patru este complicată în forma generală, de aceea vom examina mai întîi secţiunile suprafeţei cu planurile de coordonate. Secţiunea ei cu planul $z=0$ este dată de ecuaţia

$$(x^2+y^2-N_g^2)\,(N_p^2\,x^2+N_m^2\,y^2-N_p^2\,N_m^2)=0, \tag{38.8}$$

care arată că această secţiune constă din cercul

$$x^2+y^2=N_g^2$$

şi din elipsa

$$\frac{x^2}{N_m^2}+\frac{y^2}{N_p^2}=1,$$

elipsa găsindu-se în interiorul cercului.

Secţiunea suprafeţei indicilor de refracţie cu planul $x=0$ constă tot dintr-un cerc,

$$y^2+z^2=N_p^2$$

şi o elipsă

$$\frac{y^2}{N_g^2}+\frac{z^2}{N_m^2}=1;$$

în acest caz însă cercul se află în interiorul elipsei.

În sfîrşit, în secţiunea $y = 0$, cercul

$$x^2 + z^2 = N_m^2$$

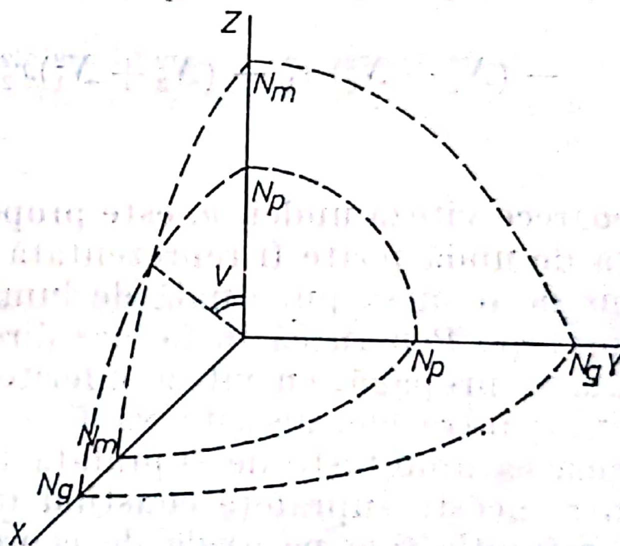
şi elipsa

$$\frac{x^2}{N_g^2} + \frac{z^2}{N_p^2} = 1$$

se intersectează.

Punctele lor comune sînt puncte de intersecţie ale suprafeţei indicilor de refracţie cu axele optice, adică cu binormalele indica-

Fig. 38.2. Secţiunile suprafeţelor indicilor de refracţie ai unui cristal biax cu planurile de coordonate.



tricei optice (ne amintim că în cristalele biaxe, binormalele şi biradialele nu coincid ca direcţie). Forma secţiunilor este dată în figura 38.2.

Reciprocitatea dintre unde şi raze, stabilită în §36, ne conduce la rezultate analoage şi pentru raze. Utilizînd substituţia (36.7), vom transcrie într-un sistem de coordonate arbitrar ecuaţia pentru determinarea pătratelor indicilor de refracţie ale razelor luminoase, care se propagă în direcţia vectorului unitar **s** de componente s_1, s_2, s_3:

$$\begin{vmatrix} \varkappa_{11} - q^{-2} & \varkappa_{12} & \varkappa_{13} & s_1 \\ \varkappa_{21} & \varkappa_{22} - q^{-2} & \varkappa_{23} & s_2 \\ \varkappa_{31} & \varkappa_{32} & \varkappa_{33} - q^{-2} & s_3 \\ s_1 & s_2 & s_3 & 0 \end{vmatrix} = 0. \qquad (38.9)$$

În sistemul de coordonate construit pe vectorii proprii ai tensorilor dielectrici, $\boldsymbol{\eta}(\omega)$ şi $\boldsymbol{\varkappa}(\omega)$, ea capătă forma (după înmulţirea cu q^4)

$$q^4(N_2^2 N_3^2 s_1^2 + N_3^2 N_1^2 s_2^2 + N_1^2 N_2^2 s_3^2) - \tag{38.10}$$
$$- q^2[(N_2^2 + N_3^2)s_1^2 + (N_3^2 + N_1^2)s_2^2 + (N_1^2 + N_2^2) s_3^2] + 1 = 0.$$

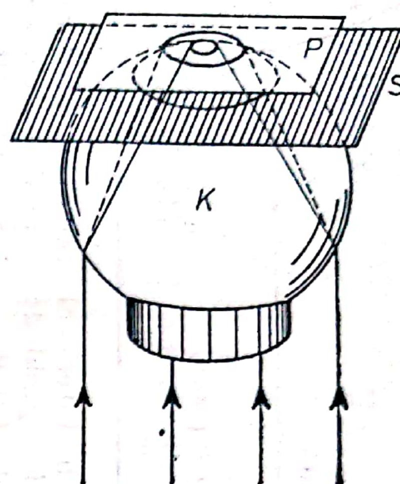
Din această ecuaţie, prin intermediul substituţiilor (38.3) şi (38.4) se obţine *ecuaţia suprafeţei de radiaţie* (uneori ea se mai numeşte suprafaţa de undă); în coordonate carteziene ea are următoarea expresie

$$(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)(N_2^2 N_3^2 x_1^2 + N_3^2 N_1^2 x_2^2 + N_1^2 N_2^2 x_3^2) -$$
$$- (N_2^2 + N_3^2) x_1^2 - (N_3^2 + N_1^2)x_2^2 - (N_1^2 + N_2^2) x_3^2 + 1 = 0. \tag{38.11}$$

Deoarece viteza undei, u, este proporţională cu mărimea q, suprafaţa de undă poate fi reprezentată intuitiv ca un front de undă, emis de o sursă punctuală de lumină, plasată în centrul acestei suprafeţe. Pentru că în fiecare direcţie care nu coincide cu biradiala se propagă, cu viteze diferite, două raze polarizate perpendicular între ele, aceasta va fi o suprafaţă cu două pînze. Ca formă ea aminteşte de suprafaţa indicilor de refracţie, diferenţa dintre aceste suprafeţe constînd în faptul că suprafaţa indicilor de refracţie taie pe axele de coordonate segmente cu lungimea de N_o, N_e sau N_g, N_m, N_p, pe cînd suprafaţa de undă taie pe aceleaşi axe, segmente avînd lungimile $1/N_o$, $1/N_e$ sau $1/N_g$, $1/N_m$, $1/N_p$. De aceea, aceste suprafeţe sînt inverse. Astfel, de exemplu, pentru un cristal negativ uniax, suprafaţa indicilor de refracţie va fi elipsoidul de rotaţie interior sferei, pe cînd suprafaţa de undă va fi sfera interioară elipsoidului (vezi fig. 38.1). La fel sînt inverse relaţiile pentru cristalele pozitive şi pentru cele biaxe (vezi tabelul 39.1).

Suprafaţa de undă a unui cristal uniax se poate vizualiza cu ajutorul unei metode intuitive, propusă de Lemmlein (1934). Conform schemei optice din figura 38.3, fasciculul de lumină converge în interiorul sferei polizate, tăiate dintr-un monocristal de calcit, deci ca şi cum ar exista o sursă punctuală, plasată în interiorul cristalului. Frontul de undă emis de această sursă punctuală se înregistrează pe o placă fotografică plană. Rotind sfera într-o montură semisferică, se poate observa secţiunea suprafeţe undei care corespunde diferitelor orientări ale axei optice (fig. 38.4)i

Fig. 38.3. Schema optică pentru observarea suprafețelor radiative ale unui cristal după G. G. Lemmlein : *K* — sferă de calcit (spat de Islanda), *S* — diafragmă, *P* — sticlă mată.



§ 39. LEGĂTURA DINTRE SUPRAFEȚELE OPTICE DIN CRISTALE. REFRACȚIA CONICĂ

Proprietățile optice ale cristalelor pot fi caracterizate prin diferite mărimi : prin vitezele de undă sau radiative, ori prin indicii de refracție, prin fluxul de energie ori prin deplasarea frontului de undă. Relațiile dintre aceste mărimi se determină cu ajutorul

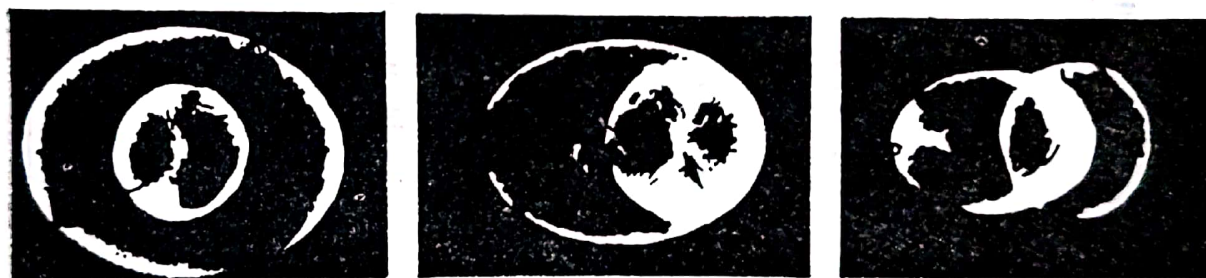


Fig. 38.4. Secțiuni ale suprafeței radiative pentru spatul de Islanda (cristal uniax, optic negativ). Foto G. G. Lemmlein (compară cu figura 38.3).

principiului dualității. Pentru fiecare dintre aceste mărimi se pot construi caracteristici sau suprafețe. Toate aceste suprafețe au fost construite de Fresnel pe baza datelor experimentale, prin observarea fenomenelor optice din cristale, în lumină polarizată și plecînd de la considerații referitoare la simetria cristalelor, cu cîteva decenii înaintea elaborării teoriei lui Maxwell. Toate aceste suprafețe pot fi deduse din elipsoidul Fresnel.

O listă generală a acestor suprafețe este dată în tabelul 39.1.

Conform principiului Neumann forma și orientarea tuturor suprafețelor optice, atît de undă cît și normale, sînt legate de simetria cristalului și, în final, depind totdeauna de tensorul permitivității dielectrice sau de tensorul susceptibilității dielectrice.

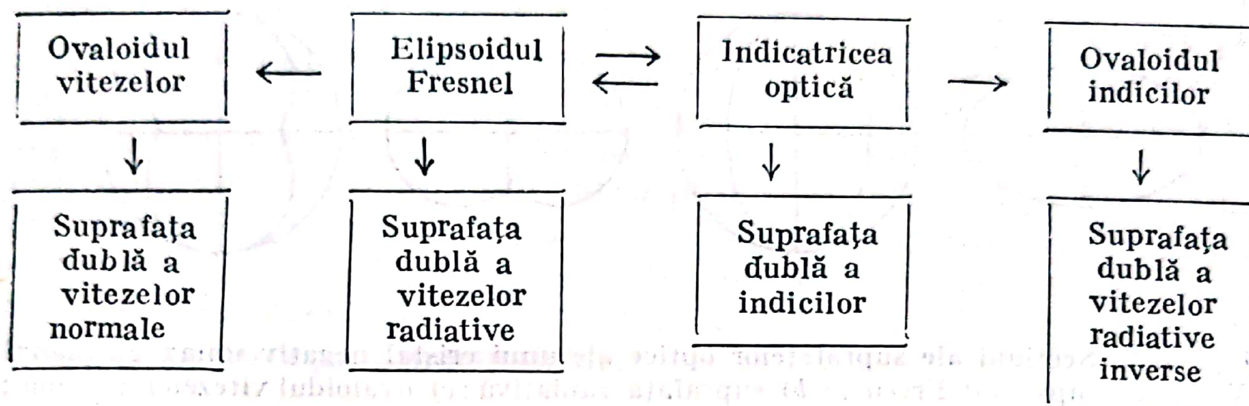
Tabelul 39.1

Suprafețele optice ale cristalelor din categoriile medie și inferioară

Caracterul optic al cristalelor	Suprafețele: Suprafața de undă (radiativă)	Indicatricea optică	Elipsoidul Fresnel	Suprafața normalelor	Suprafața indicilor de refracție (suprafața vectorilor de undă)	Suprafața inverselor vitezelor (radiative)
Uniaxe pozitive +	Elipsoid de rotație alungit în interiorul sferei	Elipsoid de rotație alungit $N_e > N_o$	Elipsoid de rotație turtit $v_o > v_e$	Ovaloid de rotație alungit, în interiorul unei sfere	Sferă în interiorul unui elipsoid de rotație turtit	Sferă în interiorul unui ovaloid de rotație turtit
Uniaxe negative −	Sferă în interiorul elipsoidului turtit	Elipsoid de rotație turtit $N_o > N_e$	Elipsoid de rotație alungit $v_e > v_o$	Sferă în interiorul unui ovaloid de rotație turtit	Elipsoid de rotație alungit, în interiorul unei sfere	Ovaloid de rotație alungit, în interiorul unei sfere
Biaxe pozitive +	Secțiunile principale sînt formate de cercuri și elipse. Prin punctele de intersecție a lor trec biradialele	$N_g - N_m > N_m - N_p$	$v_1 - v_2 < v_2 - v_3$	Cea mai mare axă, bisectoarea unghiului ascuțit	Cea mai mare axă, bisectoarea unghiului ascuțit	Secțiunile principale sînt formate de cercuri și elipse. Prin punctele de intersecție a lor trec biradialele.
		Elipsoid cu trei axe principale neegale	Elipsoid cu trei axe principale neegale	Secțiunile principale sînt formate de cercuri și ovale. Prin punctele de intersecție a lor trec axele optice	Secțiunile principale sînt formate de cercuri și elipse. Prin punctele de intersecție a lor trec axele optice	
Biaxe negative −		$N_g - N_m < N_m - N_p$	$v_1 - v_2 > v_2 - v_3$	Cea mai mare axă este bisectoarea unghiului obtuz	Cea mai mare axă este bisectoarea unghiului obtuz	

Pentru interpretarea fenomenelor optice care se observă în cristale, se utilizează, în primul rînd, indicatricea optică, suprafaţa de undă şi elipsoidul Fresnel, în unele cazuri fiind însă convenabil să se apeleze şi la celelalte suprafeţe, care sînt reciproc legate între ele (Şubnikov, 1958).

Schema legăturilor reciproce dintre suprafeţele care descriu dubla refracţie a cristalelor arată în felul următor :



Relaţiile dintre aceste suprafeţe corespund relaţiilor dintre raza şi normala la frontul de undă. Într-un mediu izotrop, în care frontul de undă care vine de la o sursă punctuală are formă

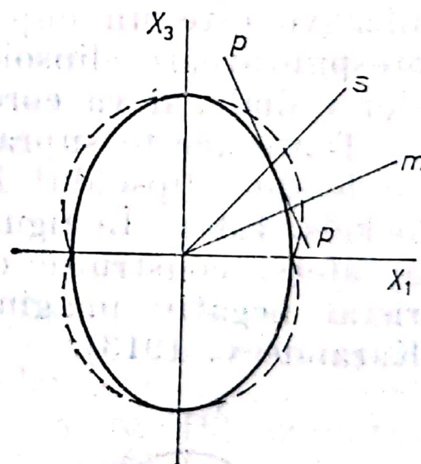


Fig. 39.1. Legătura dintre rază, normală şi secţiunile elipsoidului suprafeţelor de undă şi ovaloidului vitezelor normale.

sferică, raza şi normala la front coincid. Într-un mediu anizotrop, direcţia razei şi direcţia normalei coincid numai de-a lungul direcţiilor proprii ale tensorilor dielectrici, ceea ce deosebeşte tocmai suprafaţa „undelor" de suprafaţa „normalelor". Pentru a construi normala undei, conjugată cu o anumită rază, trebuie dus planul tangent la suprafaţa de undă în punctul de ieşire a razei, şi coborîtă perpendiculara din centrul suprafeţei pe acest plan (fig. 39.1). Raportul dintre lungimile acestor segmente este egal cu raportul dintre viteza de radiaţie şi viteza normală (adică de grup şi de fază).

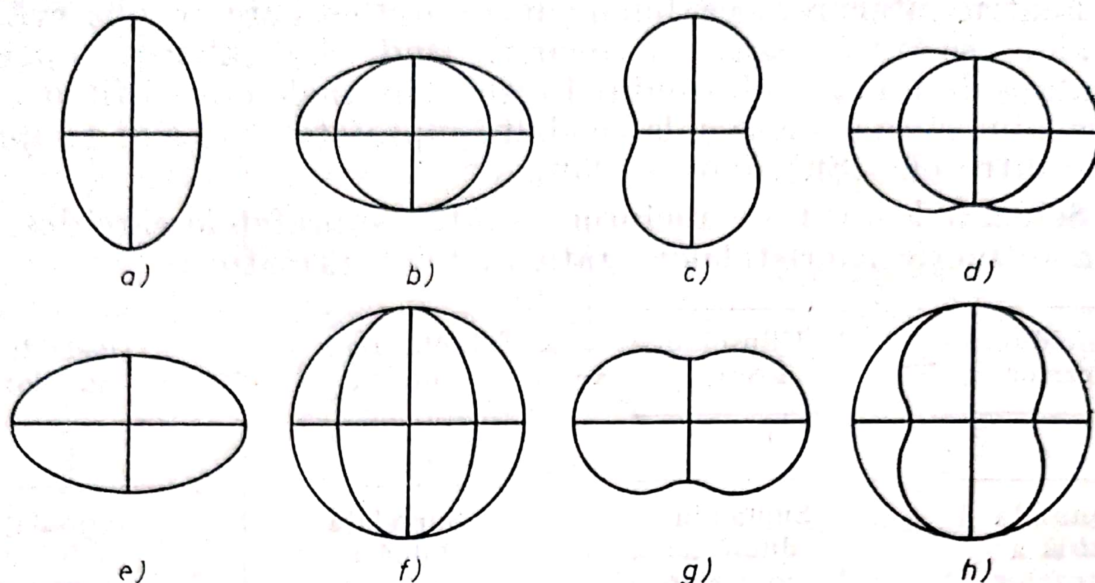


Fig. 39.2. Secţiuni ale suprafeţelor optice ale unui cristal negativ uniax cu planul X_3X_1 : *a*) elipsoidul Fresnel ; *b*) suprafaţa radiativă ; *c*) ovaloidul vitezelor undelor ; *d*) suprafaţa normalelor ; *e*) indicatricea optică ; *f*) suprafaţa indicilor de refracţie ; *g*) ovaloidul mărimilor inverse ale vitezelor radiative ; *h*) suprafaţa mărimilor inverse vitezelor radiative.

Ducînd normalele ***m***, conjugate, ale fiecărei raze *s*, se poate construi suprafaţa vitezelor normale. Dacă suprafaţa vitezelor radiative este un elipsoid, atunci suprafaţa vitezelor normale, corespunzătoare elipsoidului, va fi un ovaloid. Unei sfere a vitezelor radiale, îi va corespunde tot o sferă, a vitezelor normale.

Toate aceste suprafeţe se deduc prin construcţii geometrice simple din elipsoidul Fresnel sau din indicatricea optică (vezi Pockels, 1906). În figura 39.2 sînt reprezentate secţiunile a opt suprafeţe, construite cu păstrarea scărilor relative pentru un cristal negativ imaginar, pentru care $N_o = 1{,}86$, $N_e = 1{,}07$ (Karandeev, 1913).

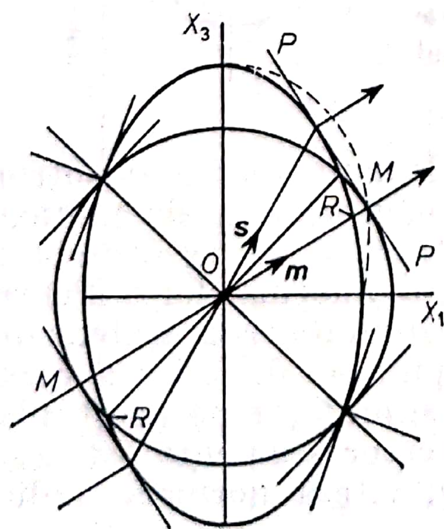


Fig. 39.3. Schemă pentru deducerea fenomenului refracţiei conice şi explicării relaţiei dintre biradiale şi binormale.

Analiza acestor suprafețe permite să se pună în evidență și să se interpreteze toate particularitățile refracției și polarizării luminii în cristale. Astfel, comparînd între ele indicatricea optică și suprafața undei, se poate explica intuitiv diferența dintre biradiale și binormale în cazul unui cristal optic biax. Biradialele corespund direcțiilor de-a lungul cărora vitezele de grup sînt aceleași, iar binormalele — direcțiilor în care sînt aceleași vitezele de fază ale undei.

Biradialele sînt perpendiculare pe secțiunile circulare ale elipsoidului Fresnel, pe cînd, binormalele sînt perpendiculare pe secțiunile circulare ale indicatricei optice. Relația dintre ele o explică figura 39.3, în care sînt reprezentate secțiunile cu planul X_3OX_1 ale suprafeței de radiație și ale suprafeței normale în cazul unui cristal biax. Cele patru puncte de intersecție ale elipsei cu cercul determină direcțiile biradialelor *RR*. Ducînd tangenta comună la cerc și la elipsă și coborînd pe ea normala *m*, găsim punctele de intersecție ale ovalului cu cercul, adică punctele ce determină direcția binormalelor.

Practic, vitezele radiative și vitezele normale (de fază și de grup) sînt atît de apropiate între ele, încît diferența dintre direcțiile binormalelor și biradialelor nu are nici o importanță nicăieri, în afară de fenomenul cu totul specific al *refracției conice.*

Secțiunii plane a fiecărei binormale îi vor corespunde raze conjugate. Trecînd de la secțiune la volum, putem să ne convingem că planul tangent, *PP*, este tangenta la suprafață de-a lungul unui cerc, aceasta însemnînd că unei singure direcții a binormalei îi va corespunde o întreagă mulțime de raze conjugate, care formează în interiorul unei lame un con gol, iar în afara lamei un cilindru gol. De aceea, dacă se taie o lamă dintr-un cristal biax, exact perpendicular pe una dintre axele sale optice (una dintre binormale) și se trimite după normala la această lamă un fascicul îngust de lumină naturală, atunci raza nu se va mai descompune numai în două raze, polarizate perpendicular între ele, ci într-o mulțime infinită de raze liniar polarizate în diferite azimuturi (fig. 39.4). O rază de lumină de la o sursă punctuală va da pe un ecran, nu un singur punct, ca în cazul în care s-ar fi propagat de-a lungul axei optice a cristalului uniax, și nici două puncte, cum ar fi fost în cazurile tuturor celorlalte direcții ale unui cristal uniax sau biax, ci un inel luminos, al cărui diametru nu variază cu îndepărtarea ecranului de lamă. Strălucirea cercului nu este aceeași : există o poziție pentru care strălucirea este maximă și o pată întunecată, care corespunde luminozității minime. Dacă se rotește analizorul în jurul direcției razei, atunci pata întunecoasă parcurge o rotație completă pe inel demonstrînd tocmai prin aceasta, că razele care construiesc cercul sînt polarizate liniar după

diferite azimuturi. În aceasta tocmai constă fenomenul de *refracție conică internă* (fig. 39.4).

Fenomenul analog — al *refracției conice externe* — constă în aceea că unei singure direcţii a biradialei îi corespunde o infinitate de unde, astfel încît normalele la ele formează un con gol (fig. 39.5). Pentru observarea refracţiei conice externe trebuie ca raza de lumină să fie trimisă prin lama tăiată exact perpendicular pe biradială (fig 39.5).

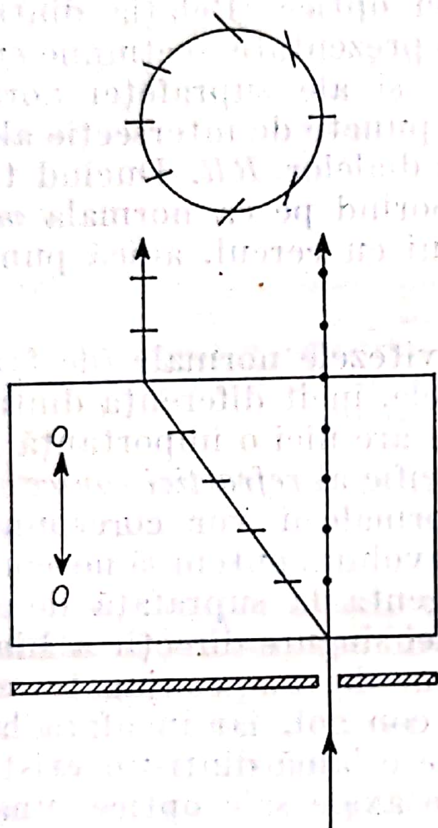


Fig. 39.4. Schema de observare a refracției conice interne: *OO* — direcţia axei optice a cristalului. Prin liniuţe şi puncte sînt reprezentate direcţiile de vibraţie.

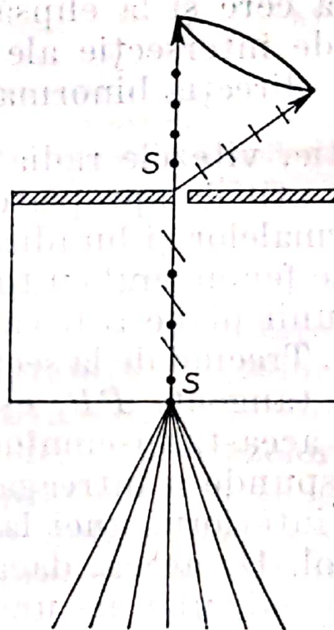


Fig. 39.5. Schema de observare a refracţiei conice exterioare: *SS* — direcţia biradialei cristalului. Liniuţele şi punctele indică direcţiile de vibraţie.

Este interesant de menţionat că descoperirea refracţiei conice reprezintă un exemplu remarcabil de previziune ştiinţifică. El a fost prevăzut de William Hamilton în 1832, numai pe baza analizei teoretice a formei suprafeţei de undă a cristalelor, construită de către Fresnel. Hamilton a propus lui Lloyd să verifice experimental concluzia sa şi, într-adevăr, un an mai tîrziu (1833), Lloyd a dat descrierea detaliată a observării experimentale a

refracţiei conice interne şi a refracţiei conice externe, la cristalul de aragonit.

Aragonitul este una dintre puţinele substanţe la care se poate vedea fenomenul de refracţie conică; pentru majoritatea substanţelor unghiul de refracţie conică este atît de mic, încît punerea experimental în evidenţă a acestui fenomen este practic imposibilă. Aşa cum rezultă din (38.7) şi (38.11), unghiul conului refracţiei conice externe, α, este dat de relaţia

$$\mathrm{tg}\,\alpha = N_p N_g \sqrt{(N_p^{-2} - N_m^{-2})\,(N_m^{-2} - N_g^{-2})}. \tag{39.1}$$

Tabelul 39.2

Unghiul conului de refracţie conică externă, α, pentru cîteva substanţe

Substanţa	α	Substanţa	α
Aragonit	1°52′	Zahăr	0°52′
Sulf	7°11′	Gips	0°18′
Acid tartric	3°54′	Mică	0°59′
Barită	0°15′	Topaz	0°16′

În tabelul 39.2 sînt date valorile unghiului α pentru unele substanţe.

În încheiere, mai remarcăm că din cauza dispersiei valorilor lui η, forma suprafeţelor optice depinde de frecvenţa undei electromagnetice incidente pe cristal (vezi § 40).

§ 40. OBSERVAREA ANIZOTROPIEI OPTICE A CRISTALELOR ÎN LUMINA POLARIZATĂ

Cunoaşterea suprafeţelor optice date în tabelul 39.1 este necesară pentru explicarea fenomenelor optice, observate în cristale, în lumina polarizată.

Observarea cristalelor în lumină polarizată se realizează cu ajutorul microscopului de polarizare sau cu instalaţii de polarizare construite ca în schema din figura 40.1. În calitate de polarizor şi analizor se utilizează polaroizi, nicoli sau alte prisme polarizante (prisma Ahrens, prisma Glan, prisma Glan-Thompson, prisma

Rochon etc.). Cînd se folosește metoda luminii convergente (vezi mai jos) în schemă se mai introduc doi condensori.

Fasciculul de lumină naturală trecînd prin polarizor devine plan polarizat, apoi, pătrunzînd în lama cristalină studiată, suferă dubla refracție, astfel încît planurile de polarizare ale celor două raze care iau naștere sînt determinate de planurile de simetrie ale indicatricei optice a cristalului supus observației și de orienta-

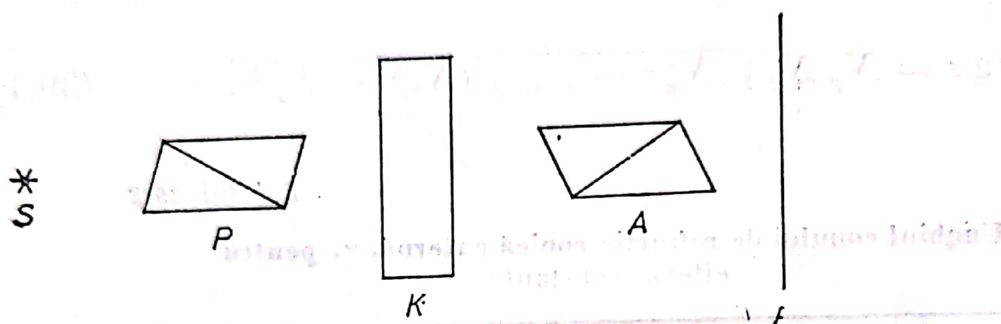


Fig. 40.1. Schema optică de observare a cristalelor în lumină polarizată paralelă: S — sursa de lumină, P — polarizorul, A — analizorul, K— lama cristalografică, E — ecranul.

rea acestora față de raza incidentă. Rolul polarizorului nu constă atît în polarizarea luminii, cît mai ales în a realiza coerența oscilațiilor incidente pe lama cristalină. Cele două raze care iau naștere prin dedublarea razei plan-polarizare sînt coerente, ceea ce înseamnă că ele pot deci interfera. Trecînd prin lama cristalină, aceste două raze capătă o diferență de drum

$$\Delta = d(n_1 - n_2), \tag{40.1}$$

unde d este grosimea lamei, n_1, n_2, indicii de refracție ai celor două raze, care în general, în cristal nu se propagă paralel, ci parcurg drumuri diferite. La ieșirea din lamă, razele merg din nou paralel, așa că dacă raza de lumină este suficient de largă, iar lama suficient de subțire, atunci ele se pot propaga în aceeași direcție, suprapunîndu-se din nou.

Razele care au trecut prin polarizor și prin lama cristalină sînt paralele, coerente și au o diferență de drum, dar pentru ca să poată interfera, mai trebuie ca planurile lor de polarizare să coincidă. Tocmai în aceasta constă menirea analizorului: el aduce oscilațiile celor două raze în același plan. Mai exact, analizorul separă acele componente ale oscilațiilor, care se află în planul său de polarizare.

În absența unei lame cristaline, intensitatea luminii care iese din sistemul optic este dată de legea lui Malus,

$$I = I_0 \cos^2\alpha; \tag{40.2}$$

aici α este unghiul dintre planurile de polarizare ale polarizorului şi analizorului, I_0 fiind intensitatea luminii care trece prin polarizor. Dacă $\alpha = 0$, nicolii sînt paraleli, observîndu-se intensitatea maximă a luminii transmise. Dacă $\alpha = 90°$, nicolii sînt „încrucişaţi" (planurile de polarizare ale polarizorului şi analizorului sînt reciproc perpendiculare) (termenii de „nicoli încrucişaţi" şi „nicoli paraleli" se utilizează prin tradiţie şi atunci cînd ca mijloace de polarizare se folosesc nu nicoli, ci polaroizi sau alte prisme), nu trece lumină prin sistemul optic, se observă extincţia cîmpului optic.

Dacă între nicolii încrucişaţi se plasează o lamă cristalină birefringentă, atunci cîmpul optic se luminează. Gradul de iluminare depinde de valoarea birefringenţei, aceasta din urmă, depinzînd, la rîndul ei, de constantele optice ale cristalului, de orientarea acestuia în raport cu axa optică a sistemului cît şi de grosimea lamei cristaline.

Fenomenul de dublă refracţie a luminii în cristale ca atare este, de regulă, destul de slab. Numai în cîteva cristale cu birefringenţă foarte puternică, cum ar fi calcitul (spatul de Islanda), salpetrul, se poate observa dubla refracţie a luminii vizual. Interferenţa luminii polarizate creează condiţii în care dublarefracţie apare deosebit de evident ca *polarizare cromatică* (*pleocroism*) *a luminii în cristale*: ca rezultat al interferenţei razelor transmise printr-o lamă cristalină, lamele subţiri apar în lumina polarizată, în general, colorate în culori de interferenţă, vii. Culoarea depinde de nuanţă, de diferenţa de drum din lamă, iar intensitatea culorii, de orientarea lamei faţă de planurile de polarizare ale polarizorului şi analizorului.

O lamă tăiată perpendicular pe axa optică a cristalului va produce extincţia luminii în cazul nicolilor încrucişaţi, exact ca o lamă dintr-o substanţă optic izotropă. Dacă lama plan-paralelă nu este tăiată perpendicular pe axa optică a cristalului birefringent, ea va apărea luminată în lumină monocromatică, iar în lumina albă — colorată.

Fie, în figura 40.2, P şi A direcţiile de oscilaţie din polarizor, şi, respectiv, în analizor, care fac între ele unghiul γ, iar I şi II direcţiile axelor principale ale elipsei după care se intersectează planul lamei cu indicatricea optică a cristalului. Ele fac cu P unghiurile α şi $90° - \alpha$, iar cu A unghiurile β şi $90° - \beta$, respectiv, astfel încît $\alpha + \beta + \gamma = 180°$. Dacă OP reprezintă amplitudinea oscilaţiilor luminoase transmise prin polarizor, atunci OM_1 şi OM_2 vor fi amplitudinile de oscilaţie ale undelor luminoase, care se propagă prin cristal. Indicii de refracţie ai acestor unde sînt notaţi cu n_1 şi n_2. Trecînd prin lama cristalină, undele capătă

diferența de fază

$$\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} d(n_1 - n_2), \tag{40.3}$$

λ fiind lungimea de undă a luminii în vid, iar d grosimea lamei. În analizor, amplitudinile acestor unde se micşorează pînă la OA_1 şi, respectiv OA_2 pe cînd diferența de fază dintre ele nu se modifică. Deci, intensitatea luminii care trece prin analizor este egală cu

$$I = (OA_1)^2 + (OA_2)^2 - 2\,(OA_1)\,(OA_2) \cos \varphi. \tag{40.4}$$

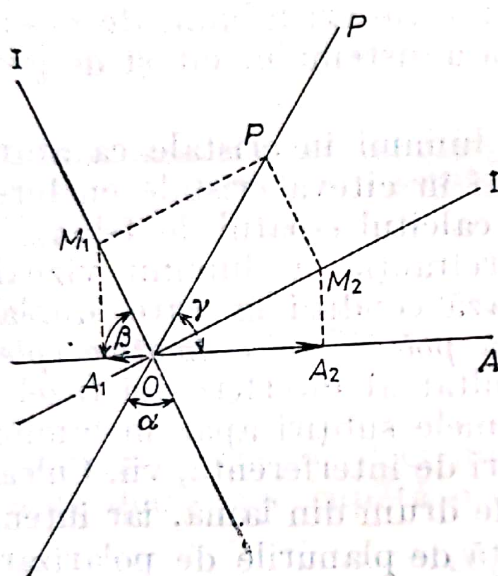


Fig. 40.2. Figura din care se deduce apariția diferenței de fază la trecerea luminii printr-o lamă cristalografică.

Dacă intensitatea luminii transmise prin polarizor este notată cu I_0, atunci

$$OP = I_0^{1/2},\quad OM_1 = I_0^{1/2} \cos \alpha,\quad OM_2 = I_0^{1/2} \sin \alpha,\quad OA_1 =$$
$$= I_0^{1/2} \cos \alpha \cos \beta,\quad OA_2 = I_0^{1/2} \sin \alpha \sin \beta.$$

Înlocuind aceste valori în (40.4), după transformări elementare obținem

$$I = I_0 \cos^2 \gamma + I_0 \sin 2\alpha \sin 2\beta \sin (\varphi/2). \tag{40.5}$$

În cazul nicolilor încrucişați, $\gamma = 90°$, $\beta = 90° - \alpha$,

$$I = I_0 \sin^2 2\alpha \sin^2 (\varphi/2), \tag{40.6}$$

iar în cazul nicolilor paraleli, $\gamma = 0$, $\beta = 180° - \alpha$,

$$I = I_0 - I_0 \sin^2 2\alpha \sin^2 (\varphi/2). \tag{40.7}$$

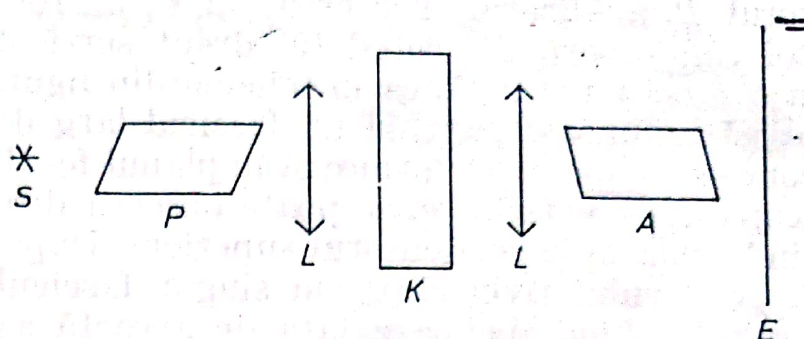


Fig. 40.3. Schema optică de observare a unui cristal în lumină polarizată convergentă : L, L — lentile condensoare ; restul notaţiilor sînt cele din figura 40.1.

În cazul nicolilor încrucişaţi, conform condiţiei generale de interferenţă, se vor întări acele raze, pentru care diferenţa de drum,

$$\Delta = d(n_1 - n_2)$$

este egală cu un număr impar de semiunde. Dacă lama cristalină se află în poziţie diagonală, astfel încît

$$\sin^2 2\alpha = 1 ,$$

fenomenul de interferenţă apare mai net, intensitatea coloraţiei este maximă. La rotirea lamei cu o tură completă în jurul direcţiei fasciculului de lumină care trece prin ea, adică, în jurul axei optice a instalaţiei de polarizare, de patru ori se va obţine o extincţie totală şi tot de patru ori o coloraţie de intensitate maximă.

Deoarece expresiile (40.6) şi (40.7) însumate îl dau pe I_0, rezultă că în nicoli paraleli coloraţia va fi complementară : în poziţie diagonală lama va fi viu colorată în culorile complementare, iar la o rotire completă, se vor găsi patru poziţii, în care ea pare albă. Coloraţia depinde de grosimea şi de orientarea plăcuţei.

Cercetarea cristalelor în lumină polarizată, paralelă se utilizează pentru măsurarea dublei refracţii, a grosimii unui cristal, în practica mineralogică şi petrografică pentru diagnosticarea cristalelor, mai ales a rocilor.

Studiul cristalelor în lumină polarizată, convergentă permite să se determine orientarea şi caracterul indicatricei optice, să se măsoare unghiul dintre axele optice ale unui cristal biax, să se determine semnul optic al cristalului, să se depisteze axele optice şi rotaţia planului de polarizare, să se stabilească cantitativ şi calitativ modificarea indicatricei optice sub influenţa acţiunilor exterioare (vezi efectul piezoelectric şi efectul electrooptic, § 77).

Schema optică pentru studierea unui cristal în lumină polarizată, convergentă, este dată în figura 40.3. În afară de polari-

zorul P, analizorul A și cristalul C, un rol esențial îl au aici cei doi condensori, L. Totodată, drept sursă de lumină nu se mai ia o sursă punctuală, ca în schema din figura 40.1, ci o suprafață plană luminoasă care dă un fascicul larg de raze paralele (figura conoscopică, care se formează în planul focal al obiectivului microscopului de polarizare, se poate observa direct cu ochiul, îndepărtînd ocularul și condensorul superior). După direcția axei optice a dispozitivului trece doar un singur fascicul, cel central, pe cînd celelalte, fiind înclinate față de această axă, vor traversa lama cristalină analizată sub diferite unghiuri, care sînt cu atît mai mari, cu cît fasciculul iese mai departe de centrul cîmpului optic.

Pe lama cristalină de studiat cade un fascicul convergent de raze polarizate, fiecare dintre ele descompunîndu-se în cristal în două raze cu planurile de oscilație perpendiculare între ele. Cea de a doua lentilă condensor concentrează aceste raze, focalizîndu-le în planul focal al obiectivului. Fiecare dintre fasciculele de raze paralele care trec prin lamă după o anumită direcție va fi focalizat într-un anumit punct din planul focal al obiectivului. La privirea acestui punct prin analizor, se va observa rezultatul interferenței din fasciculul de raze paralele considerat. În cîmpul vizual considerat în întregime se vede, dintr-odată, întreaga figură, care, în cazul cînd fasciculul este paralel s-ar putea observa succesiv, prin rotirea lamei în jurul axei verticale și a celei orizontale. Ca rezultat al interferenței fasciculelor de lumină ce traversează lama cristalină sub toate unghiurile posibile, apar figurile de interferență caracteristice, numite *figuri conoscopice*. Aspectul de ansamblu al figurilor conoscopice depinde atît de simetria cristalului (de categoria cristalografică), de orientarea indicatricei optice, de grosimea cristalului și de valoarea birefringenței cît și de apertura microscopului și de compoziția spectrală a luminii.

Figura conoscopică, observată în cazul nicolilor încrucișați, este formată din izogire și izocrome. Se numesc *izogire* benzile întunecate, formate în totalitatea punctelor ce corespund tuturor direcțiilor din cristal, după care se propagă razele, avînd oscilațiile paralele cu planurile de polarizare ale nicolilor încrucișați. *Izocromele* sînt zonele colorate în diferitele culori de interferență (la observarea în lumină albă), fiecare dintre ele corespunzînd direcțiilor pentru care diferența de drum este aceeași.

Dacă se rotește lama cristalină în jurul direcției razei, atunci izogirele își modifică de regulă forma și orientarea, pe cînd izocromele nu și le schimbă.

Figura conoscopică caracteristică unui cristal uniax, tăiat perpendicular pe axa optică, are aspectul unei cruci negre, formată din cele două izogire și o întreagă serie de cercuri izocrome

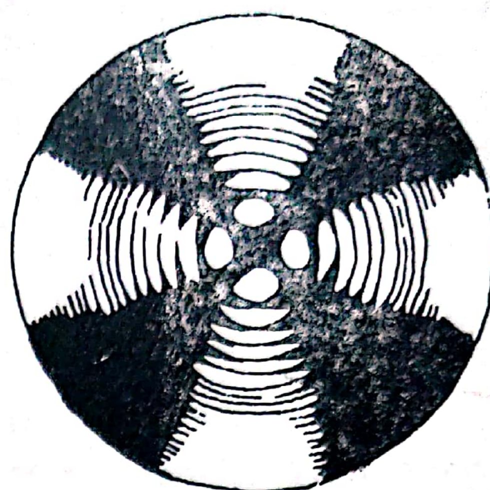


Fig. 40.4. Figura conoscopică a unui cristal optic uniax, observată perpendicular pe axa optică.

colorate, concentrice (vezi fig. 40.4, în care izocromele sînt reprezentate prin zone albe și negre). La o rotație completă a lamei figura nu se schimbă.

Dacă normala la lamă face un unghi cu axa optică a cristalului, atunci centrul crucii izogirelor nu va mai coincide cu centrul cîmpului vizual, iar în cazul rotirii lamei, crucea va descrie un cerc în jurul centrului cîmpului vizual. Dacă unghiul dintre axa optică a lamei și rază este suficient de mare, atunci în cîmpul vizual se vede numai o singură izogiră, existînd unele poziții pentru care izogirele în general nu mai apar în cîmpul vizual al microscopului (fig. 40.5).

Pentru explicarea figurii conoscopice reprezentată în figura 40.4, observăm că în fiecare punct al său vibrațiile undei extraordinare sînt orientate după raza cercului, iar oscilațiile undei ordinare după tangentele la acesta. Acolo unde ambele direcții de oscilație sînt paralele cu direcțiile de oscilație din nicoli, se

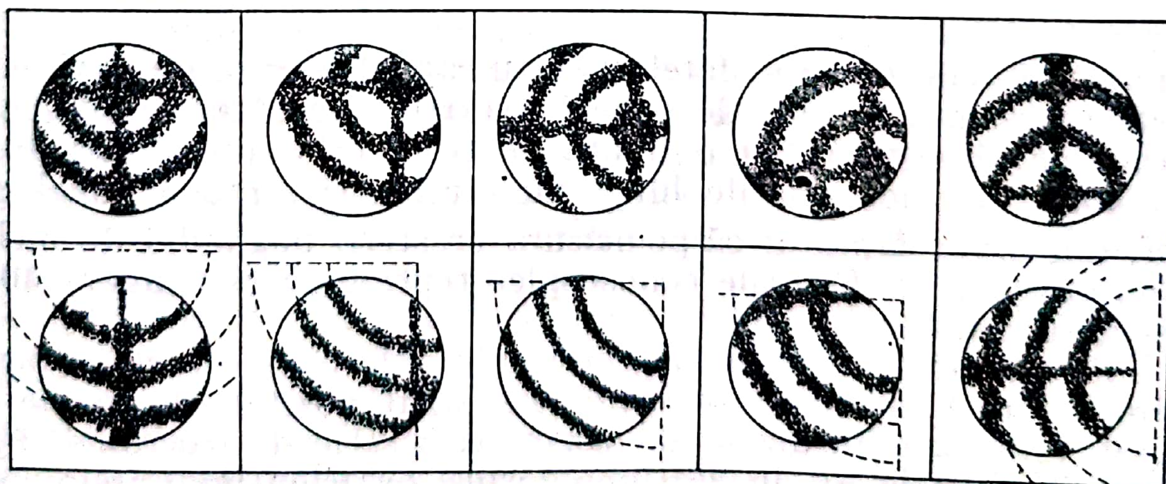


Fig. 40.5 Figura conoscopică a unui cristal optic uniax, observată sub diferite unghiuri față de axa optică.

observă extincția, care dă tocmai crucea neagră. În centrul figurii $n_e = n_o$ valoarea dublei refracții, Δn, crescînd de la centru spre periferie, deoarece n_e diferă tot mai mult de n_o. În afară de aceasta, pe măsura creșterii unghiului de înclinare a razelor, crește lungimea drumului optic al ambelor raze din lamă. Diferența de drum

$$\Delta = \frac{d}{n_e - n_o}$$

crește de la centru spre margine, astfel încît ramurile crucii se lărgesc întrucîtva de la centru spre periferie. Cercurile colorate sînt cu atît mai dese cu cît lama este mai groasă și cu cît birefringența este mai mare.

După direcțiile care fac unghiul β cu axa optică, diferența de drum dintre raza ordinară și raza extraordinară, care au traversat lama de grosime d, va fi egală cu

$$\Delta = d(N_e - N_o)\sin^2\beta. \tag{40.8}$$

Cercurile colorate ale izocromelor corespund condiției $\Delta = M_\lambda$, în care M este un număr întreg. Dacă grosimea lamei, $d = \text{const}$, atunci

$$\sin^2\beta = \frac{M_\lambda}{d(N_e - N_o)}, \tag{40.9}$$

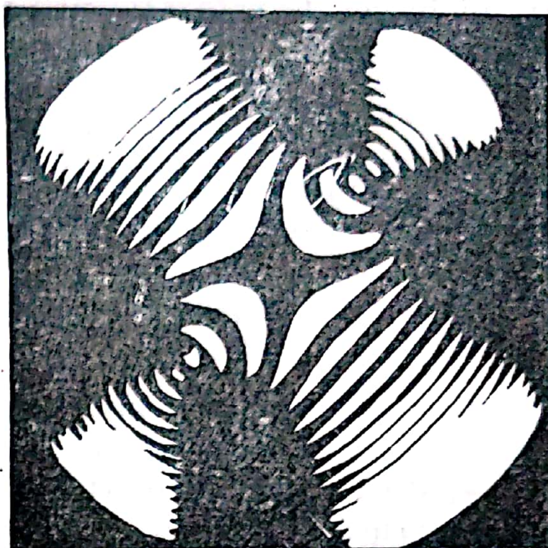
iar în cazul unui unghi β mic, punînd $\sin\beta \approx \beta$ avem

$$\beta_n \sim \sqrt{M}. \tag{40.10}$$

De aici se vede că suprafețele pentru care diferența de fază este egală reprezintă o serie de conuri coaxiale, ale căror secțiuni cu planul de observare dau o figură de tipul celor din figura 40.4 sau 40.5. Practic, valorile lui β nu cresc strict proporțional cu $\sqrt{M}$, din cauza faptului că pe măsura creșterii unghiului de înclinare, crește și d. Figurile conoscopice reprezentate în figura 40.5 se explică analog.

Figura conoscopică a unui cristal biax într-o secțiune perpendiculară pe bisectoarea ascuțită, în cazul poziției diagonale a lamei, este formată din două izogire și o serie de izocrome (fig. 40.6). Izocromele au în secțiune forma ovalelor lui Cassini, al căror caz particular îl constituie lemniscata. Izogirele au formă de hiperbole care diverg (fig. 40.6).

Fig. 40.6. Figura conoscopică a unui cristal biax, observată perpendicular pe bisectoarea ascuţită.



Cele două puncte înconjurate de cercurile lemniscatelor corespund punctelor de ieşire ale axelor optice. În apropierea punctelor de ieşire ale axelor, lemniscatele sînt cercuri concentrice în jurul fiecăreia dintre axe, iar mai departe se contopesc în curbe sub formă de opt, comune pentru ambele axe.

Unghiul $2V$, dintre axele optice ale unui cristal biax, se poate măsura după figura conoscopică, direct din distanţa dintre punctele de ieşiri ale axelor optice ; la calcularea acestui unghi trebuie să se ţină cont de diferenţa dintre valorile unghiurilor în interiorul cristalului şi în aer.

Suprafaţa de aceeaşi diferenţă de fază a cristalului biax se construieşte la fel ca pentru un cristal uniax.

După metoda lui Şubnikov, figura conoscopică poate fi observată în lumină polarizată, paralelă, examinînd nu o lamă plan-paralelă, ci o sferă cristalină. În acest caz, sfera însăşi joacă atît rolul de condensor cît şi de obiectiv.

Se poate, de asemenea, observa figura conoscopică, depunînd pe suprafaţa cristalului o semisferă de sticlă sau o picătură de lichid cu indicele de refracţie mare. În practică, această metodă se utilizează pentru determinarea rapidă a orientării cristalului şi evaluarea omogenităţii sale optice.

Proprietăţile optice ale cristalelor, în special tensorii $\varkappa$ şi η precum şi indicele de refracţie, n, depind de frecvenţa luminii, de temperatură şi de alţi factori. Acest fenomen se numeşte *dispersie* (dispersia de frecvenţă, dispersia de temperatură etc. ; în § 81 va fi examinată dispersia spaţială). Cea mai importantă este dispersia de frecvenţă. Caracterul dispersiei tensorilor optici în cazul cristalelor cu simetrii diferite este esenţial diferit. Astfel, în cazul cristalelor optic izotrope, ea se reduce la dispersia indicelui de refracţie : $n = n(\omega)$. La cristalele optic uniaxe, depind de frecvenţă

ambii indici de refracţie principali :

$$N_o = N_o(\omega),\ N_e = N_e(\omega).$$

În ciuda faptului că, pentru frecvenţele la care cristalul este transparent, indicii de refracţie cresc totdeauna cu frecvenţa,

$$\mathrm{d}N_o/\mathrm{d}\omega > 0 \text{ şi } \mathrm{d}N_e/\mathrm{d}\omega > 0,$$

viteza acestei creşteri poate fi atît de diferită, încît la o anumită frecvenţă să se schimbe chiar semnul birefringenţei. Pentru lumina de această frecvenţă, cristalul pare optic izotrop. Astfel, cristalele tetragonale de apofilit şi de torbernit, în lumină roşie sînt optic pozitive, în lumină albastră — optic negative, în lumină verde — optic izotrope. Într-un cristal tetragonal de vezuvian, schimbarea de semn este inversă : el este optic pozitiv în lumină albastră şi negativ în lumină roşie. Cristalul de tiogalat de argint ($AgGaS_2$) este optic pozitiv pentru lumina cu lungimea de undă mai mică de 497,4 nm (în vid), dar optic negativ pentru lumina cu lungimea de undă mai mare ca această valoare (Hobden, 1968). Pentru lumina cu $\lambda_0 = 497{,}4$ μm, cristalul de tiogalat de argint se comportă ca un mediu optic izotrop (fig. 40.7) în ciuda simetriei sale tetragonale. Utilizarea acestui fenomen original este descrisă în § 81.

În cristalele optic uniaxe se observă dispersia atît a indicilor de refracţie cît şi dispersia birefringenţei. Direcţia axei optice în aceste cristale este însă determinată univoc de simetria cristalului (ea coincide totdeauna cu axa de simetrie principală) şi deci nu suferă dispersie.

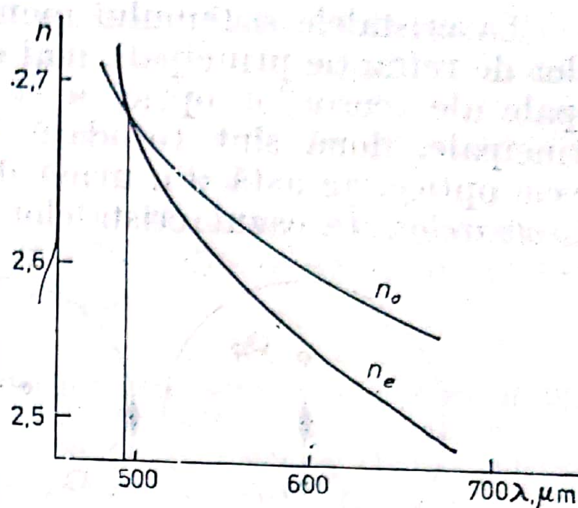
Cele mai variate manifestări ale dispersiei se observă la cristalele biaxe, fiind întrucîtva diferite în cristalele din sistemele diferite ale categoriei superioare.

În cristalele sistemului rombic este posibilă dispersia indicilor de refracţie principali,

$$N_1 = N_1(\omega),\ N_2 = N_2(\omega),\ N_3 = N_3(\omega),$$

direcţiile axelor principale ale tensorilor $\boldsymbol{\varkappa}(\omega)$ şi $\boldsymbol{\eta}(\omega)$ fiind însă rigid legate de elementele de simetrie ale cristalelor (de axele de ordinul doi sau de normalele la planurile de simetrie) nu suferă dispersie. Direcţiile axelor optice din cristalele sistemului rombic în general vorbind sînt supuse dispersiei : cînd frecvenţa variază axele optice se rotesc una către cealaltă sau se îndepărtează una de cealaltă, rămînînd tot timpul în planul de simetrie al tensorilor

Fig. 40.7. Dispersia indicilor de refracție ai tiogalatului de argint (Hobden, 1968).



optici și totodată astfel încît bisectoarele unghiurilor dintre axele optice își păstrează direcția. Aceste modificări pot fi foarte mari. De exemplu, în cazul cristalelor Rb_2SO_4 unghiul $2V$ pentru lumina roșie este egal cu 36°25′, iar pentru cea albastră, 61°50′. Odată cu modificarea frecvenței, unghiul dintre axele optice poate trece de valoarea 90° ; la această frecvență cristalul biax își schimbă semnul. Un caz deosebit de interesant este cazul în care, în timpul variației frecvenței, unul dintre indicii de refracție principali devine egal cu celălalt. Pentru lumina de această frecvență, cristalul devine optic uniax : pozitiv, dacă la această frecvență $N_m = N_p$, negativ, dacă $N_m = N_g$. Însă particularitatea situației nu se limitează la aceasta. Este vorba de faptul că graficele $N_i = N_i(\omega)$, la această frecvență de regulă, se intersectează (este mult mai puțin probabil să fie tangente), și, din această cauză, de o parte și de cealaltă a punctului de intersecție, drept indici medii de refracție, N_m, sînt luați indicii de refracție principali care sînt însă diferiți (adică indici de refracție care corespund axelor principale care sînt diferite). Aceasta, însemnînd în continuare că pentru lumina de anumite frecvențe, drept plan al axelor optice va servi un plan de simetrie a cristalului, pe cînd pentru lumina de alte frecvențe, un alt plan.

În cazul cristalelor de brookit (modificația rombică a TiO_2), pentru lumina roșie și lumina galbenă, planul axelor optice este (001), iar pentru lumina albastră (010). Pentru lumina cu $\lambda = 670$ nm unghiul dintre axele optice ale brookitului este $2V = 58°$, pentru $\lambda = 535$ nm, $2V = 21°40'$, iar pentru $\lambda = 550$ nm, unghiul $2V = 0$, cristalul este optic uniax.

Dispersia indicilor de refracție se constată direct în figura conoscopică : marginile întunecate ale hiperbolei lîngă punctul de ieșire a axei optice capătă o irizare (tiv) colorată, ale cărei nuanțe, în regiunile convexă și concavă ale hiperbolei, sînt complementare.

La cristalele sistemului monoclinic, în afară de dispersia indicilor de refracție principali, mai există și o dispersie a axelor principale ale tensorilor optici $\varkappa$ și η; deoarece dintre cele trei axe principale, două sînt totodată bisectoare ale unghiurilor dintre axele optice, această din urmă dispersie se mai numește *dispersia bisectoarelor*. În cazul cristalelor monoclinice, una dintre cele trei

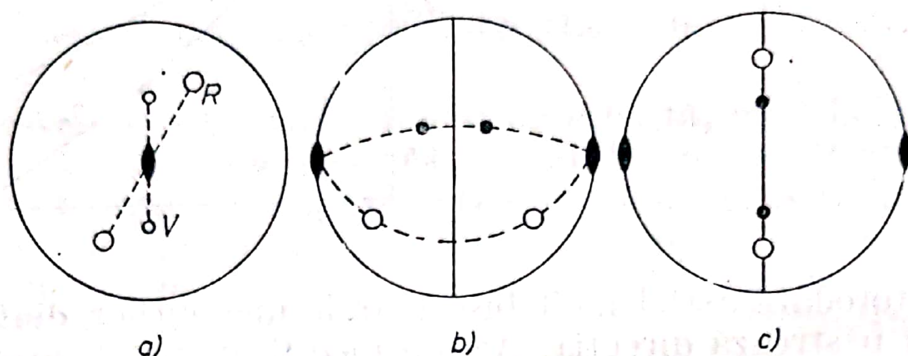


Fig. 40.8. Tipurile principale de dispersie a axelor optice și a bisectoarelor în cristalele monoclinice : *a*) dispersia în lumină convergentă, *b*) dispersie paralelă, *c*) dispersie oblică. Prin cerculețe negre sînt reprezentate ieșirile axelor pentru lumina violetă (*v*), iar cu cerculețe albe pentru roșie (*r*).

axe principale își păstrează direcția (cînd sistemul cristalografic de coordonate este luat ca de obicei, această direcție ese [010]) iar celelalte două se rotesc în jurul ei, rămînînd în același plan (010), perpendicular pe ea. Planul axelor optice ale unui cristal monoclinic, fie că coincide cu planul cristalografic (010), fie că este perpendicular pe el; în cel de al doilea caz, odată cu variația frecvenței luminii, planul, de regulă, se rotește față de cristal. În consecință, în cristalele monoclinice sînt posibile două tipuri principale de dispersie a axelor optice, reprezentate schematic în figura 40.8.

În figura conoscopică, dispersia axelor optice se manifestă nu numai sub forma irizării colorate a contururilor izogirelor, ci și prin schimbarea coloritului lemniscatelor; în cadrul aceluiași inel, însă de părți diferite, față de axa optică, se observă o colorație diferită.

La cristalul monoclinic de ghips ($CaSO_4 \cdot 7H_2O$) se manifestă extrem de intens dispersia de temperatură. La temperatura camerei planul axelor optice este perpendicular la planul (010), unghiul dintre axele optice fiind $2V = 62°$. Prin încălzire acest unghi se micșorează atît de repede, încît la temperatura de 116°C este deja egal cu zero, astfel încît cristalul devine optic uniax. Dacă cristalul se încălzește în continuare, axele optice încep să diveargă din nou, de data aceasta însă în planul (010).

Caracterul dispersiei axelor optice se studiază de obicei analizînd figura conoscopică, într-o secțiune, după o direcție aproxi-

mativ perpendiculară pe bisectoarea ascuţită. În acest caz, modificările datorate dispersiei figurii conoscopice, cînd planul axelor optice este perpendicular la planul (010), sînt întrucîtva diferite de cazurile în care bisectoarea ascuţită coincide cu [010] faţă de situaţia cînd ea este perpendiculară la această direcţie; primul caz este numit *dispersie încrucişată*, iar al doilea *dispersie orizontală* sau *paralelă*. În cazul în care unghiul dintre axele optice este apropiat de 90°, aceste diferenţe dispar.

Asupra proprietăţilor optice ale cristalelor vezi Born (1937); Born şi Wolf (1970); Born şi Huang (1958); Ditchbern (1965); Karandeev (1913); Landau şi Lifşiţ (1957); Landsberg (1957); Melanholin (1970); F. I. Fiodorov (1958); Şubnikov (1958); Pockles (1906); Ramachandran, Ramaseshnan (1961).

CAPITOLUL 5

SIMETRIA TENSORILOR DE RANG SUPERIOR

§ 41. TENSORII ŞI PSEUDOTENSORII DE RANG SUPERIOR

Pe lîngă tensorii de rangul doi, în fizica cristalelor se utilizează şi tensorii de rangul trei, patru şi de rang şi mai înalt. Ei se introduc prin aceleaşi procedee ca şi tensorii de rangul doi. Fie, de exemplu, un vector $\boldsymbol{P}$, ale cărui componente depind liniar de componentele unui tensor de rangul doi, $\boldsymbol{\sigma}$

$$P_l = d_{lmn}\, \sigma_{mn}\,; \tag{41.1}$$

d_{lmn} sînt coeficienţii dependenţei liniare. Vectorul $\boldsymbol{P}$ şi tensorul $\boldsymbol{\sigma}$ pot fi însă raportaţi şi la un alt sistem, „nou", de coordonate. Dacă $\|c_{i'l}\|$ este matricea de trecere de la sistemul de coordonate „vechi" la cel nou, atunci componentele vectorului $\boldsymbol{P}$ în noul sistem de coordonate sînt egale cu

$$P_{i'} = c_{i'l}\, P_l = c_{i'l}\, d_{lmn}\, \sigma_{mn}. \tag{41.2}$$

Să împărţim valorile componentelor σ_{mn} ale tensorului $\boldsymbol{\sigma}$ din sistemul de coordonate vechi prin valorile lor $\sigma_{j'k'}$ din sistemul nou

$$\sigma_{mn} = c_{j'm}\, c_{k'n}\, \sigma_{j'k'}. \tag{41.3}$$

Înlocuind σ_{mn} în formula (41.2), obţinem

$$P_{i'} = c_{i'l}\, d_{lmn}\, c_{j'm}\, c_{k'n}\, \sigma_{j'k'}. \tag{41.4}$$

Dacă în sistemul vechi de coordonate dependenţa liniară a componentelor vectorului $\boldsymbol{P}$ de componentele tensorului $\boldsymbol{\sigma}$ se determină cu ajutorul unui set de coeficienţi d_{lmn}, în noul sistem, aceeaşi dependenţă se determină cu ajutorul coeficienţilor

$$d_{i'k'} = c_{i'l} c_{j'm}\, c_{k'n}\, d_{lmn}. \tag{41.5}$$

La fel se deduce şi formula pentru transformarea coeficienţilor d_{lmn} în cazul trecerii de la noul sistem la cel vechi

$$d_{lmn} = c_{i'l}\, c_{j'm}\, c_{k'n}\, d_{i'j'k'}. \tag{41.6}$$

Legile de transformare (41.5) și (41.6) sînt aceleași ca și pentru produsele componentelor a trei vectori. Prin urmare, avem de a face cu o anumită mărime geometrică, adică cu o mărime $\boldsymbol{d}$, ce există independent de sistemul de coordonate și care, în orice sistem de coordonate se caracterizează printr-un set de numere, d_{lmn}; la trecerea de la un sistem de coordonate la altul, aceste numere se transformă ca produsele componentelor a trei vectori. O asemenea mărime se numește *tensor de rangul trei*, iar numerele d_{lmn} și $d_{i'j'k'}$ sînt *componentele* acestui tensor în vechiul și, respectiv, în noul sistem de coordonate.

La noțiunea de tensor de rang trei se poate ajunge și în alt mod, și anume considerînd dependența liniară a componentelor unui tensor de rangul doi, ζ, de componentele unui vector, $\boldsymbol{E}$

$$\zeta_{ij} = r_{ijk} E_k ; \tag{41.7}$$

coeficienții r_{ijk} vor fi, de asemenea, componente ale tensorului $\boldsymbol{r}$, tensor de rangul trei.

Aceleași procedee permit și introducerea tensorilor de rangul patru, cinci și de rang și mai înalt. De exemplu, coeficienții s_{ijkl}, care exprimă dependența liniară a componentelor ε_{ij} ale unui tensor $\boldsymbol{\varepsilon}$ în funcție de componentele σ_{kl} ale tensorului $\boldsymbol{\sigma}$

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl}, \tag{41.8}$$

sînt componentele tensorului de rangul patru, $\boldsymbol{s}$; coeficienții Q_{ijklm}, care definesc dependența liniară a componentelor s_{ijkl} ale tensorului de rangul patru, $\boldsymbol{s}$, de componentele E_m ale vectorului $\boldsymbol{E}$

$$s_{ijkl} = Q_{ijklm} E_m, \tag{41.9}$$

sînt componentele tensorului de rangul patru, $\boldsymbol{Q}$. Se poate formula o regulă generală : coeficienții dependenței liniare ai componentelor unui tensor de rangul r, de produsele componentele tensorilor de rangurile $r_1, \ldots, r_k$, sînt componentele unui tensor al cărui rang este egal cu $r + r_1 + \ldots + r_k$.

O altă operație matematică al cărei rezultat este apariția tensorilor o constituie diferențierea tensorilor în raport cu tensorii. Fie, de pildă, componentele vectorului $\boldsymbol{P}$ funcții de componentele tensorului $\boldsymbol{\sigma}$. Să introducem pentru derivatele parțiale notația

$$\frac{\partial P_l}{\partial \sigma_{mn}} = d_{lmn}, \tag{41.10}$$

iar pentru derivatele spațiale în noul sistem de coordonate

$$\frac{\partial P_{i'}}{\partial \sigma_{j'k'}} = d_{i'j'k'}. \tag{41.11}$$

După cum se poate arăta ușor,

$$d_{i'j'k'} = c_{i'l}\, c_{j'm}\, c_{k'n}\, d_{lmn}\,; \tag{41.12}$$

ceea ce înseamnă că d_{lmn} sînt componente ale unui tensor de rangul trei. Analog se tratează și problema diferențierii unui tensor în raport cu cîțiva tensori. Ca urmare, ajungem la următoarea regulă generală : derivatele parțiale ale unui tensor de rang r în raport cu componentele tensorilor de rangurile $r_1, \ldots, r_k$ sînt componente ale unui tensor al cărui rang este egal cu $r + r_1 + \ldots + r_k$.

Tensorii de rang superior se pot scrie și ei sub forma fără coordonate, folosind vectorii bazei, ca de exemplu,

$$\mathbf{d} = d_{lmn}\, \boldsymbol{e}_l\, \boldsymbol{e}_m\, \boldsymbol{e}_n. \tag{41.13}$$

Trecerea la noua bază, adică înlocuirea vectorilor $\boldsymbol{e}_l$ prin combinațiile lor liniare

$$\boldsymbol{e}_{i'} = c_{i'l}\, \boldsymbol{e}_l$$

(unde $\boldsymbol{e}_{i'}$ sînt, ca și vectorii $\boldsymbol{e}_l$, ortonormați), ne conduce la rezultatul, ușor de demonstrat, că același tensor va căpăta forma

$$\mathbf{d} = d_{i'j'k}\, \boldsymbol{e}_{i'}\, \boldsymbol{e}_{j'}\, \boldsymbol{e}_{k'},\ \ d_{i'j'k'} = c_{i'l}\, c_{j'm}\, c_{k'n}\, d_{lmn}, \tag{41.14}$$

ceea ce este în deplină concordanță cu formulele (41.5) și (41.12).

Regulile operațiilor cu tensorii sînt următoarele.

Înmulțirea cu un număr. *Produsul dintre tensorul* **A**, care are componentele $A_{ij\ldots k}$ (față de o anumită bază ortonormată, dată mai înainte, $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$) *și un număr* λ este tensorul de același rang, $\lambda\mathbf{A}$, ale cărui componente (față de aceeași bază) sînt $\lambda A_{ij\ldots k}$.

Adunarea tensorilor. *Suma* a doi tensori de același rang, **A** și **B**, de componente $A_{ij\ldots k}$ și $B_{ij\ldots k}$ este tensorul de același rang, **D**, ale cărui componente vor fi

$$D_{ij\ldots k} = A_{ij\ldots k} + B_{ij\ldots k}.$$

Tensorii de rang diferit nu se pot aduna.

Înmulţirea tensorilor. *Produsul* dintre tensorul **A**, de rang p, avînd componentele $A_{i_1 \ldots i_p}$ şi tensorul **B**, de rang q, ale cărui componente sînt $B_{k_1 \ldots k_q}$ este tensorul $\mathbf{D} = \mathbf{AB}$, de rang $p + q$, avînd componentele

$$D_{i_1 \ldots i_p k_1 \ldots k_q} = A_{i_1 \ldots i_p} B_{k_1 \ldots k_q}.$$

Ordinea factorilor este esenţială: tensorul $\mathbf{F} = \mathbf{BA}$, în general nu este egal cu tensorul **D**. Aplicată vectorilor, această operaţie se numeşte *produs diadic*.

Formarea izomerilor. Permutînd, într-un mod oarecare, indicii tensorului **D**, obţinem un tensor **F**, de acelaşi rang cu **D**; **F** este unul dintre *izomerii* tensorului **D**. În particular, în cazul exemplului analizat mai sus, de înmulţire a tensorilor, tensorul $\mathbf{F} = \mathbf{BA}$ este izomerul tensorului $\mathbf{D} = \mathbf{AB}$

$$F_{k_1 \ldots k_q i_1 \ldots i_p} = D_{i_1 \ldots i_p k_1 \ldots k_q}.$$

Simetrizarea şi alternarea. Tensorul **B** este *tensorul simetric lui* **A**, dacă el este egal cu media aritmetică a tuturor izomerilor posibili ai tensorului **A**; tensorul **B** este *tensorul alternativ* lui **A**, dacă în media aritmetică menţionată, izomerii obţinuţi prin permutarea pară a indicilor sînt luaţi cu semnul plus, iar cei obţinuţi prin permutarea impară, cu semnul minus. Simetrizarea şi alternarea se notează scriind indicii între paranteze rotunde, respectiv pătrate. De exemplu,

$$B_{ijk} = A_{(ijk)} = \frac{1}{6}(A_{ijk} + A_{jki} + A_{kij} + A_{ikj} + A_{jik} + A_{kji}),$$

$$D_{ijk} = A_{[ijk]} = \frac{1}{6}(A_{ijk} + A_{jki} + A_{kij} - A_{ikj} - A_{jik} - A_{kji}).$$

Simetrizarea şi alternarea sînt posibile şi numai în raport cu o parte dintre indici, scriindu-se între paranteze, în acest caz, numai această parte. De exemplu,

$$A_{i(jk)} = \frac{1}{2}(A_{ijk} + A_{ikj}), \; A_{[ij]k} = \frac{1}{2}(A_{ijk} - A_{jik}).$$

Contracţia tensorilor. Din tensorul **A**, al cărui rang este $r \geq 2$, se poate obţine un tensor **B**, de rang $r-2$, dacă se efectuează însumarea componentelor tensorului **A** după o pereche oarecare de indici.

De exemplu, tensorul **B**, cu componentele $B_{ijk} = A_{ijkll}$ este rezultatul *contracției* tensorului de rangul cinci în raport cu ultimii doi indici. În cazul alegerii altor indici de contracție, se obține un alt tensor de rangul trei, de exemplu, $D_{ijk} = A_{llijk}$; în general, $\mathbf{D} \neq \mathbf{B}$. Contracția se combină adesea cu înmulțirea. De exemplu, în formula $P_i = d_{ijk}\, \sigma_{jk}$ este conținută înmulțirea tensorului **d** cu tensorul **σ**, urmată de dubla contracție ulterioară a tensorului rezultat, de rangul cinci.

În cadrul fiecăreia dintre definițiile enumerate este indispensabil în demonstrație cuvîntul „tensor": se cere să se demonstreze că setul de mărimi obținut ca rezultat al operațiilor respective se transformă la trecerea de la un sistem de coordonate la altul după o lege tensorială. Cu alte cuvinte, este necesar să se verifice dacă cele două căi duc sau nu la unul și același rezultat: 1) efectuăm operația respectivă (adunare, înmulțire, contracție etc.) asupra componentelor tensorilor în vechiul sistem de coordonate, iar după aceasta, considerînd că mărimile obținute sînt componentele unui tensor, le raportăm la noul sistem de coordonate; 2) exprimăm componentele tuturor tensorilor dați în noul sistem de coordonate și numai după aceasta le aplicăm operațiile respective.

Să examinăm, de pildă, produsul dintre un tensor de rangul întîi **A** și un tensor de rangul doi, **B**:

prima cale: $A_l\, B_{mn} = D_{lmn}$, $D^{(1)}_{i'j'k'} = c_{i'l}\, c_{j'm}\, c_{k'n}\, D_{lmn}$:

a doua cale: $A_{i'} = c_{i'l}\, A_l$, $B_{j'k'} = c_{j'm}\, c_{k'n}\, B_{mn}$, $D^{(2)}_{i'j'k'} = A_{i'}\, B_{j'k'}$;

Se cere să se demonstreze că $D^{(1)}_{i'j'k'} = D^{(2)}_{i'j'k'}$.

Pe lîngă tensori, în fizica cristalelor se utilizează și *pseudotensorii*. Un tensor **A** de rang r este un set de 3^r mărimi, $A_{k_1 \ldots k_r}$, care, la trecerea de la coordonatele vechi la cele noi, se transformă conform legii

$$A_{i'_1 \ldots i'_r} = c_{i'_1 k_1} \ldots c_{i'_r k_r}\, A_{k_1 \ldots k_r}, \tag{41.15}$$

unde $\|c_{i'k}\|$ este matricea transformării. Pseudotensorul **B** se deosebește de tensorul de același rang, **A**, prin faptul că la trecerea în noile coordonate componentele lui, $B_{k_1 \ldots k_r}$, se înmulțesc suplimentar cu determinantul matricei transformării $\Delta = \det \|c_{i'k}\|$

$$B_{i'_1 \ldots i'_r} = \Delta c_{i'_1 k_1} \ldots c_{i'_r k_r}\, B_{k_1 \ldots k_r}. \tag{41.16}$$

Pseudotensorii de rang inferior, adică pseudoscalarul și pseudovectorul, au fost studiați în § 23.

§. 42. SIMETRIA INTERNĂ A TENSORILOR ȘI LEGĂTURA DUALĂ

În fizica cristalelor se utilizează adesea tensori de rang superior, simetrici în raport cu anumiți indici. Un tensor se numește tensor *simetric* în raport cu doi sau mai mulți indici, dacă toți

izomerii lui, care se deosebesc între ei prin permutarea tocmai a acestor indici, sînt egali între ei. Astfel, componentele unui tensor de rangul trei, simetric în raport cu ultimii doi indici, satisfac condiția

$$d_{ikl} = d_{ilk}, \tag{42.1}$$

componentele unui tensor de rangul trei, simetric în raport cu toți cei trei indici, condițiile

$$f_{ikl} = f_{ilk} = f_{kli} = f_{kil} = f_{lik} = f_{lki} \tag{42.2}$$

iar componentele unui tensor de rangul patru, simetric în raport cu primii doi indici și cu ultimii doi indici, condițiile

$$p_{ijkl} = p_{jikl} = p_{ijlk} = p_{jilk}. \tag{42.3}$$

În fizica cristalelor se întîlnesc și tensori simetrici în raport cu grupuri întregi de indici. Așa este, de exemplu, tensorul de rangul patru, în care se pot permuta nu numai indicii din prima și din cea de a doua pereche, ci se pot permuta și înseși perechile între ele

$$s_{ijkl} = s_{jikl} = s_{ijlk} = s_{jilk} = s_{klij} = s_{klji} = s_{lkij} = s_{lkji}, \tag{42.4}$$

precum și tensorul în care se permută numai perechile de indici, însă nu se pot permuta indicii din cadrul perechii

$$n_{ijkl} = n_{klij}. \tag{42.5}$$

Proprietatea unui tensor de a fi simetric (sau antisimetric) în raport cu anumiți indici sau grupuri de indici, se numește *simetrie internă* a tensorului. Faptul că simetria internă este într-adevăr o proprietate a unui tensor trebuie demonstrat. Demonstrațiile sînt însă simple; în fond ele se reduc la a arăta că dacă am găsit un anumit tip de simetrie internă, atunci raportînd tensorul la un anumit sistem tip de coordonate, vom găsi același tip de simetrie internă în orice alt sistem de coordonate.

Pentru evitarea unei exprimări verbale complicate a simetriei interne a tensorilor, fizicianul teoretician Jahn (Jahn, 1949) a propus un sistem de notare simplu și comod. Simetria internă a unui vector se notează cu litera V. Simetria internă a unui tensor de rang r se notează cu simbolul V^r, amintind astfel că componentele tensorului de rang r se transformă ca și produsele componentelor a r vectori.

Un tensor simetric de rangul doi se notează $[V^2]$ — acest simbol arătînd că componentele tensorului dat se transformă ca produsele celor două componente ale unuia și aceluiași vector. În general, simetria internă a unui tensor de rang r, simetric în raport cu toți indicii, se notează cu $[V^r]$ — componentele lui se transformă ca produsele a r componente ale unuia și aceluiași vector. Astfel, simetria internă a unui tensor $\mathfrak{f}$, definită prin formula (42.2), se notează cu $[V^3]$. Dacă un tensor de rangul r este simetric în raport cu q indici, simetria lui internă se notează cu $[V^q]\ V^{r-q}$; de exemplu, simetria internă, exprimată de formula (42.1), se notează $V[V^2]$ (notația simetriei interne nu arată care anume sînt pozițiile ocupate de indicii în raport cu care tensorul este simetric; ea se referă la toți izomerii, iar în exprimarea verbală și în exemple s-a luat unul dintre aceștia, fie cel mai comod, fie cel utilizat cel mai frecvent în fizica cristalelor).

Se mai întîlnesc și notații mai complicate:

— $[V^2][V]^2$ sau simplu $[V^2]^2$ reprezintă simetria internă a unui tensor de rangul patru, care este simetric în raport cu prima pereche de indici și cu cea de a doua pereche de indici (formula (42.3));

— $[V^2]^3$ reprezintă simetria internă a unui tensor de rangul șase, simetric în raport cu prima, cu a doua și cu a treia pereche de indici;

— $[(V^2)^2]$ exprimă simetria internă a unui tensor de rangul patru, simetric în raport cu permutarea unei perechi de indici (formula (42.5));

— $[[V^2]^2]$ arată simetria internă a unui tensor de rangul patru, simetric în raport cu prima și a doua pereche de indici precum și în raport cu permutarea lor (formula (42.4)).

În toate cazurile exponentul rezultat al lui V este egal cu rangul tensorului.

Notația lui Jahn permite și descrierea simetriei interne a pseudotensorilor. Prefixul „pseudo" se notează cu ε: simetria internă a unui pseudovector (adică a unui vector axial, vezi § 23) se exprimă cu simbolul εV, a unui pseudotensor simetric de rangul doi prin simbolul $\varepsilon[V^2]$ etc. Simetria internă a unui scalar o vom nota cu simbolul 1; atunci simetria internă a unui pseudoscalar va fi notată desigur cu ε.

În fizica cristalelor tensorii simetrici de rang superior definesc, adesea, dependențe liniare în care participă tensori simetrici de rangul doi. De exemplu, tensorul cu simetria internă $V[V^2]$ (v. relația (42.1)) definește dependența liniară a unui tensor de rangul doi, $[V^2]$ de vectorul V

$$\varepsilon_{kl} = d_{ikl} E_i \quad (\varepsilon_{kl} = \varepsilon_{lk}), \tag{42.6}$$

iar tensorul $[V^2]^2$ (v. (42.3)) dependența liniară a unui tensor simetric de rangul doi, $[V^2]$ de un altul

$$\zeta_{ij} = p_{ijkl}\,\varepsilon_{kl} \quad (\zeta_{ij} = \zeta_{ji}, \quad \varepsilon_{kl} = \varepsilon_{lk}). \tag{42.7}$$

Tensorii simetrici de rang superior se obțin și ca urmare a diferențierii în raport cu argumentele care sînt mărimi tensoriale. Astfel, diferențierea unei funcții scalare în raport cu vectorul V și cu tensorul simetric de rangul doi $[V^2]$ duce la tensorul $V[V^2]$ (v. (42.1))

$$d_{ikl} = -\frac{\partial^2\Phi}{\partial E_i\,\partial\sigma_{kl}} \quad (\sigma_{kl} = \sigma_{lk})\,; \tag{42.8}$$

diferențierea de două ori a unei funcții scalare în raport cu un tensor simetric de rangul doi, $[V^2]$ duce la un tensor cu simetrie internă $[[V^2]^2]$ (v. (42.2))

$$s_{ijkl} = -\frac{\partial^2\Phi}{\partial\sigma_{ij}\,\partial\sigma_{kl}} \quad (\sigma_{ij} = \sigma_{ji}), \tag{42.9}$$

iar diferențierea de două ori în raport cu un tensor nesimetric de rangul doi, V^2, la tensorul $[(V^2)^2]$ (v. 42.5))

$$n_{ijkl} = -\frac{\partial^2\Phi}{\partial\gamma_{ij}\,\partial\gamma_{kl}} \quad (\gamma_{ij} \neq \gamma_{ji}). \tag{42.10}$$

Numărul componentelor independente ale unui tensor simetric este mai mic decît cel al unui tensor nesimetric. În timp ce un tensor V^3 are 27 (3^3) componente independente, tensorul $V[V^2]$ are 18 (6×3) (acest fapt rezultă deosebit de clar din formulele (42.6) și (42.8)), pe cînd tensorul $[V^3]$ are numai 10 componente independente (trei componente de la forma f_{111} + 6 componente de la forma f_{122} + 1 componentă de la forma f_{123}). Analog, tensorul V^4 are 81 (3^4) componente independente, iar pentru tensorul de forma $[V^2]^2$ numărul lor este de 36 (6^2), pentru tensorul de forma $[[V^2]^2]$ 21$[6\times(6+1)/2]$, iar pentru tensorul de tipul $[(V^2)^2]$ 45 $[9\times(9+1)/2]$ componente independente.

Alături de tensorii simetrici se utilizează și tensorii antisimetrici (uneori în locul cuvîntului „antisimetric" se utilizează expresia „simetric oblic"). Un tensor este *antisimetric* în raport cu doi sau trei indici (în spațiul tridimensional tensorii antisimetrici în raport cu mai mult de trei indici sînt identic egali cu zero) dacă izomerii săi, care diferă între ei prin permutarea pară a acestor indici, sînt egali unul cu altul, pe cînd în cazul permutării impare, sînt antiegali (egali în mărime, dar de semn contrar). După Jahn,

20 — c. 292

antisimetria tensorilor se notează analog simetriei, însă nu cu paranteze pătrate, ci cu acolade. De exemplu, simetria internă a unui tensor de rangul trei, antisimetric în raport cu primii doi indici se notează $V\{V^2\}$ sau $\{V^2\}V$ fiind definită prin egalitățile

$$\beta_{ijk} = -\beta_{jik}, \tag{42.11}$$

în timp ce simetria internă a unui tensor de rangul trei antisimetric în raport cu toți indicii săi se notează cu $\{V^3\}$ fiind definită prin egalitățile*

$$e_{ijk} = e_{jki} = e_{kij} = -e_{ikj} = -e_{jik} = -e_{kji}. \tag{42.12}$$

Acest tensor se remarcă prin aceea că el are numai o singură componentă independentă. Într-adevăr, dacă printre indici ar fi cel puțin doi indici egali, atunci componenta corespunzătoare ar fi egală cu zero, iar toate cele șase componente diferite de zero ar avea o permutare oarecare a numerelor 1, 2, 3, fiind deci legați între ei prin cele cinci egalități (42.12). Dacă, de exemplu, $e_{123} = 1$, atunci

$$e_{lmn} = \begin{cases} 1 \text{ pentru } lmn = 123,\ 231,\ 312\,; \\ -1 \text{ pentru } lmn = 132,\ 213,\ 321\,; \\ 0 \text{ în celelalte cazuri.} \end{cases} \tag{42.13}$$

Prezintă interes comportarea componentelor tensorului e în cadrul transformărilor de coordonate. Dacă în sistemul vechi de coordonate aceste componente se determină cu formula (42.13), atunci în noul sistem, la care trecerea este dată de matricea $\|c_{i'l}\|$, ele vor fi egale cu

$$e_{i'j'k} = c_{i'l}\, c_{j'm}\, c_{k'n}\, e_{lmn}.$$

Calculînd această sumă pentru cîteva valori ale indicilor $i'j'k'$ și comparînd-o cu mărimea $\Delta = \det \|c_{i'l}\|$, ne vom convinge că

$$e_{i'j'k'} = \begin{cases} \Delta \text{ pentru } i'j'k' = 123,\ 231,\ 312\,; \\ -\Delta \text{ pentru } i'j'k' = 132,\ 213,\ 321\,; \\ 0 \text{ în celelalte cazuri.} \end{cases} \tag{42.14}$$

---

* Notația lui Jahn se bazează pe aplicarea notațiilor reprezentărilor după care se transformă tensorii respectivi; astfel, V^2, $[V^r]$ și $\{V^r\}$ sînt puterile, simplă, simetrică și antisimetrică ale reprezentării vectoriale a lui V.

Pe de altă parte, compararea formulelor (42.13) şi (42.14) arată că toate componentele tensorului e (sau, dacă este cazul, singura lui componentă independentă) prin trecerea la noul sistem de coordonate se înmulţesc cu determinantul matricei transformării, adică sînt pseudoscalari (compară cu relaţia (42.11)). Prin urmare, acest tensor este invariant faţă de toate rotaţiile proprii posibile, adică faţă de grupul rotaţiilor simetria lui este $\infty\infty$.

Simbolul Levi-Civita a fost definit în § 13 prin condiţia

$$\sigma_{lmn} = \begin{cases} 1 \text{ pentru } lmn = 123,\ 231,\ 312\,; \\ -1 \text{ pentru } lmn = 132,\ 213,\ 321\,; \\ 0 \text{ în celelalte cazuri,} \end{cases} \tag{42.15}$$

în orice sistem de coordonate. Compararea cu tensorul e arată că în acest caz δ trebuie să fie un pseudotensor de rangul trei, deoarece componentele lui, prin trecerea la un nou sistem de coordonate, se transformă după legea

$$\delta_{i'j'k'} = \Delta c_{i'l}\, c_{j'm}\, c_{k'n}\, \delta_{lmn}, \tag{42.16}$$

unde $\Delta = \det \| c_{i'l} \|$. Întrucît, în general, aceste componente nu se modifică la nici un fel de transformări ortogonale, grupul de simetrie al tensorului este grupul ortogonal $\infty\infty m$.

Cu ajutorul pseudotensorului Levi-Civita, legătura dintre un pseudoscalar şi un tensor antisimetric de rangul trei poate fi exprimată analitic sub forma

$$e_{ijk} = \psi\delta_{ijk}, \quad \psi = \frac{1}{6}\,\delta_{ijk}\, e_{ijk}\,; \tag{42.17}$$

în care ψ este pseudoscalarul unitar, fiind egal cu $+1$ într-un sistem de coordonate drept şi cu -1 într-un sistem de coordonate stîng.

Pseudotensorul Levi-Civita permite, de asemenea, să se stabilească corespondenţa inversă, dintre un vector axial, $\overset{\circ}{a}$, şi tensorul antisimetric de rangul doi, $\mathbf{A} = -\mathbf{A}^*$

$$A_{mn} = -\,\delta_{lmn}\, a_l, \quad a_l = -\frac{1}{2}\,\delta_{lmn}\, A_{mn}. \tag{42.18}$$

Această corespondenţă se păstrează pentru orice transformări ortogonale. Într-adevăr,

$$- \delta_{i'j'k'}\, a_{i'} = - \Delta c_{i'l}\, c_{j'm}\, c_{k'n}\, \delta_{lmn}\, \Delta c_{i'p}\, a_p =$$

$$= - c_{j'm}\, c_{k'n}\, \delta_{lmn}\, \delta_{lp}\, a_p = - c_{j'm}\, c_{k'n}\, \delta_{lmn}\, a_l = c_{j'm}\, c_{k'n}\, A_{mn} = A_{j'k'}$$

(aici este folosită relaţia (42.16), identităţile $\Delta^2=1$ şi $c_{i'l}\, c_{i'p}=\delta_{lp}$).

În fond, legătura dintre vectorul axial, $\overset{\circ}{a}$, şi tensorul antisimetric, **A**, exprimată prin relaţiile (42.18), constituie de fapt două forme de scriere ale aceluiaşi obiect geometric. Acelaşi lucru, se înţelege, se poate spune şi despre un tensor e, cu simetria internă $\{V^3\}$ şi un pseudoscalar ψ, legaţi între ei prin relaţiile (42.17).

Relaţiile (42.17), (42.18) şi altele asemănătoare lor se numesc *relaţiile dualităţii* : tensorul simetric de rangul doi este dual cu vectorul axial, tensorul antisimetric de rangul trei, cu un pseudoscalar, iar un pseudotensor antisimetric de rangul trei, cu un scalar.

Relaţiile dualităţii se pot scrie foarte laconic şi expresiv cu ajutorul codului Jahn : relaţia (42.17), de pildă, poate fi scrisă sub forma

$$\{V^3\} \sim \varepsilon, \tag{42.19}$$

iar relaţia (42.18), sub forma

$$\{V^2\} \sim \varepsilon V. \tag{42.20}$$

Avantajul deosebit al acestei forme de scriere îl constituie posibilitatea deducerii exclusiv formale a noilor relaţii ale dualităţii din relaţii deja cunoscute. Astfel, înmulţind ambele părţi ale relaţiei (42.19) cu ε şi observînd că $\varepsilon^2 = 1$ (produsul dintre doi pseudoscalari este un scalar), obţinem

$$\varepsilon\{V^3\}\, V \sim 1, \tag{42.21}$$

care nu este altceva decît relaţia de dualitate dintre pseudotensorul antisimetric de rangul trei şi un scalar. Înmulţind cu V ambele părţi ale relaţiei (42.20), obţinem

$$\{V^2\}\, V \sim \varepsilon V^2, \tag{42.22}$$

adică un tensor de rangul trei antisimetric în raport cu doi indici este dual cu un pseudotensor de rangul doi, în general nesimetric. Înmulţind ambele părţi ale relaţiei (42.20) cu ε, găsim

$$\varepsilon\{V^2\} \sim V, \tag{42.23}$$



deci un pseudotensor antisimetric de rangul doi este dual cu un vector polar obişnuit. Relaţiile (42.22) şi (42.23) se utilizează în teoria activităţii optice a cristalelor (v. § 81).

§ 43. SCRIEREA TENSORILOR FĂRĂ COORDONATE. OPERAŢIILE DIFERENŢIALE INVARIANTE ASUPRA TENSORILOR

Aşa cum s-a remarcat în § 41, tensorii de rang superior se pot scrie într-o formă care nu foloseşte coordonatele. De exemplu, un tensor de rangul trei în scrierea fără coordonate capătă forma

$$\mathbf{d} = d_{ijk}\, \boldsymbol{e}_i\, \boldsymbol{e}_j\, \boldsymbol{e}_k.$$

Scrierea fără utilizarea coordonatelor a înmulţirii unui tensor cu un număr şi adunarea tensorilor nu mai necesită explicaţii. Înmulţirea tensorilor se va nota scriind tensorii care se înmulţesc în ordinea cuvenită, fără vreun semn între ele. Înmulţirea cu contragere ulterioară este firesc să fie notată prin semnul *produsului scalar*. Într-adevăr, dacă se convine că semnul produsului scalar înseamnă înmulţirea scalară a tensorului cu vectorii vecini, atunci produsul scalar dintre vectorul $\boldsymbol{P} = P_l \boldsymbol{e}_l$ şi tensorul $\boldsymbol{d}$, de exemplu, va fi egal cu

$$\boldsymbol{P}\cdot\mathbf{d} = P_l\, \boldsymbol{e}_l\cdot d_{ijk}\, \boldsymbol{e}_i\, \boldsymbol{e}_j\, \boldsymbol{e}_k = \boldsymbol{P}_l\, d_{ijk}\,(\boldsymbol{e}_l\cdot\boldsymbol{e}_i)\, \boldsymbol{e}_j\, \boldsymbol{e}_k =$$

$$= P_l\, d_{ijk}\, \delta_{li}\, \boldsymbol{e}_j\, \boldsymbol{e}_k = P_i\, d_{ijk}\, \boldsymbol{e}_j\, \boldsymbol{e}_k. \qquad (43.1)$$

S-a obţinut un tensor de rangul doi cu componentele $P_i\, d_{ijk}$.

Dacă însumarea s-ar fi făcut după ultimul indice al tensorului $\mathbf{d}$, tensorul corespunzător s-ar fi putut obţine permutînd factorii

$$\mathbf{d}\cdot\boldsymbol{P} = d_{ijk}\, \boldsymbol{e}_i\, \boldsymbol{e}_j\, \boldsymbol{e}_k\cdot P_l\, \boldsymbol{e}_l = d_{ijk}\, P_k\, \boldsymbol{e}_i\, \boldsymbol{e}_j. \qquad (43.2)$$

Dacă însă însumarea s-ar fi cerut să se facă după indicele mijlociu al tensorului $\mathbf{d}$, atunci de fapt nu am fi ştiut deloc să scriem această operaţie în forma fără coordonate. Din fericire, în cadrul scrierii relaţiilor tensoriale, în fizica cristalelor se reuşeşte evitarea unor astfel de situaţii. Ne salvează de ele simetria internă a tensorilor care se utilizează în fizica cristalelor. Într-adevăr, dacă un tensor $\mathbf{d}$ ar fi simetric în raport cu toţi indicii, atunci ar fi, în general, indiferent care dintre ei este considerat indice de însumare. Dacă însă tensorul $\mathbf{d}$ este simetric în raport cu doi indici (să zicem al doilea şi al treilea), acest fapt este deja suficient pentru a se putea scrie în forma fără coordonate toate tipurile posibile de contragere a acestui tensor cu un vector, deoarece însumarea după al doilea indice dă, în acest caz, acelaşi rezultat ca şi însumarea în raport cu al treilea indice.

O generalizare naturală a produsului scalar a doi tensori, examinat mai sus (adică înmulţirea lor cu contragerea ulterioară în raport cu un indice al fiecărui tensor) este *produsul biscalar* al tensorilor, care se deosebeşte de produsul scalar prin faptul că contragerea se efectuează în raport cu doi indici de la fiecare tensor. Semnul produsului biscalar (:) indică faptul că cei doi vectori care se găsesc imediat la stînga după el se înmulţesc scalar cu cei doi vectori care se află imediat în dreapta sa. Dacă, de exemplu, $\mathbf{s} = s_{ijkl}\, \boldsymbol{e}_i\, \boldsymbol{e}_j\, \boldsymbol{e}_k\, \boldsymbol{e}_l$ şi $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_{mn}\, \boldsymbol{e}_m\, \boldsymbol{e}_n$, atunci produsul biscalar al acestor tensori va fi un tensor de rangul doi

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma} = s_{ijkl}\, \boldsymbol{e}_i\, \boldsymbol{e}_j\, \boldsymbol{e}_k\, \boldsymbol{e}_l : \sigma_{mn}\, \boldsymbol{e}_m\, \boldsymbol{e}_n =$$

$$= s_{ijkl}\, \sigma_{mn}\, \boldsymbol{e}_i\, \boldsymbol{e}_j\, (\boldsymbol{e}_k \cdot \boldsymbol{e}_m)\, (\boldsymbol{e}_l \cdot \boldsymbol{e}_n) = s_{ijkl}\, \sigma_{kl}\, \boldsymbol{e}_i\, \boldsymbol{e}_j. \qquad (43.3)$$

Componentele ε_{ij} ale produsului biscalar $\mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}$ vor fi deci egale cu

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\, \sigma_{kl}.$$

Produsul biscalar $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{s}$ are, evident, componentele $\eta_{kl} = \sigma_{ij}\, s_{ijkl}$.

Cu ajutorul semnului produsului biscalar se pot scrie componentele tensorilor de rangurile trei şi patru. De pildă, componentele unui tensor de rangul trei, $\mathbf{d}$, şi ale unui tensor de rangul patru, $\mathbf{s}$, sînt egale respectiv cu

$$\mathrm{d}_{ikl} = \boldsymbol{e}_i \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{e}_k\, \boldsymbol{e}_l,$$

$$s_{ijkl} = \boldsymbol{e}_i\, \boldsymbol{e}_j : \mathbf{s} : \boldsymbol{e}_k\, \boldsymbol{e}_l. \qquad (43.4)$$

Produsul biscalar poate fi aplicat şi tensorilor de rangul doi. De exemplu, componentele unui tensor de rangul doi, $\boldsymbol{\sigma}$, pot fi scrise la fel de bine în oricare dintre următoarele trei forme

$$\sigma_{ij} = \boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{e}_j = \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{e}_i\, \boldsymbol{e}_j = \boldsymbol{e}_i\, \boldsymbol{e}_j : \boldsymbol{\sigma}. \qquad (43.5)$$

În cazul scrierii fără coordonate se utilizează şi semnul $\times$; el înseamnă înmulţirea vectorială cu vectorii vecini lui. De exemplu, produsul vectorial dintre tensorul $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_{ij}\, \boldsymbol{e}_i\, \boldsymbol{e}_j$ şi vectorul $\boldsymbol{p} = p_k\, \boldsymbol{e}_k$ va fi, conform definiţiei, egal cu

$$\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{p} = \sigma_{ij}\, \boldsymbol{e}_i\, \boldsymbol{e}_j \times p_k\, \boldsymbol{e}_k = \sigma_{ij}\, p_k\, \boldsymbol{e}_i\, (\boldsymbol{e}_j \times \boldsymbol{e}_k),$$

şi aplicînd identităţile $\boldsymbol{e}_j \times \boldsymbol{e}_k = \delta_{jkl}\, \boldsymbol{e}_l$ el capătă forma finală

$$\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{p} = \delta_{jkl}\, \sigma_{ij}\, p_k\, \boldsymbol{e}_i\, \boldsymbol{e}_l. \qquad (43.6)$$

În fizica mediilor continue se utilizează foarte des operaţiile diferenţiale invariante : aplicarea operatorului gradient unui cîmp scalar, $\varphi(\boldsymbol{r})$, notat grad φ, precum şi a operatorului divergenţă, div $\boldsymbol{u}$, şi a operatorului rotor, rot $\boldsymbol{u}$, unui cîmp vectorial, $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})$. Operaţii analoage se aplică şi mărimilor de dimensiuni tensoriale mai înalte. Vom utiliza în aceste cazuri aceleaşi notaţii, dar cu litere mari.

Gradientul cîmpului vectorial $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})$ este un tensor de rangul doi, Grad $\boldsymbol{u}$, cu componentele

$$(\text{Grad}\, \boldsymbol{u})_{ij} = \frac{\partial u_j}{\partial x_i}. \tag{43.7}$$

Tensorul transpus lui, $\partial \boldsymbol{u}/\partial \boldsymbol{r}$, se numeşte *derivata cîmpului vectorial* $\boldsymbol{u}$ *în raport cu raza vectoare* $\boldsymbol{r}$

$$\left(\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{r}}\right)_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \tag{43.8}$$

Partea simetrică a fiecăruia dintre aceşti tensori se numeşte *deformaţia cîmpului vectorial,* $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})$ şi se notează Def $\boldsymbol{u}$

$$\text{Def}\, \boldsymbol{u} = \frac{1}{2}\left(\text{Grad}\, \boldsymbol{u} + \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{r}}\right), \ (\text{Def}\, \boldsymbol{u})_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right). \tag{43.9}$$

Divergenţa cîmpului tensorial $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{r})$ este vectorul Div $\boldsymbol{\sigma}$ cu componentele

$$(\text{Div}\ \boldsymbol{\sigma})_j = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i}. \tag{43.10}$$

Cînd este necesar să se diferenţieze în raport cu al doilea indice, se utilizează divergenţa tensorului transpus, $\boldsymbol{\sigma}^*$

$$(\text{Div}\ \boldsymbol{\sigma}^*)_j = \frac{\partial \sigma_{jk}}{\partial x_k}. \tag{43.11}$$

Dacă un cîmp tensorial, $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{r})$ este definit în toate punctele suprafeţei S, atunci integrala de suprafaţă

$$\oint_S \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} dS$$

se numeşte *fluxul cîmpului tensorial* σ (uneori, fluxul tensorului σ) prin această suprafaţă. Dacă însă acest cîmp este definit (şi diferenţiabil continuu) şi pe întregul volum V, limitat de suprafaţa închisă S, atunci este valabilă *teorema lui Gauss-Ostrogradski*

$$\oint_S \boldsymbol{n} \cdot \sigma \, dS = \int_V \text{Div } \sigma \, dV, \tag{43.12}$$

adică fluxul unui cîmp tensorial printr-o suprafaţă închisă este egal cu divergenţa totală a aceluiaşi cîmp tensorial din volumul mărginit de această suprafaţă. Demonstraţia teoremei Gauss-Ostrogradski, pentru cîmpurile tensoriale, rezultă direct din demonstraţia arhicunoscută a acestei teoreme pentru cîmpurile vectoriale şi de aceea nu o mai dăm aici.

În fine, *rotorul unui cîmp tensorial* $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ este un pseudotensor de acelaşi rang, Rot ε avînd componentele

$$(\text{Rot } \varepsilon)_{il} = \delta_{ijk} \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x_j}. \tag{43.13}$$

Rot ε se poate considera ca produsul vectorial: Rot $\varepsilon = \nabla \times \varepsilon$. Atunci cînd trebuie să se diferenţieze în raport cu al doilea indice, se utilizează Rot ε^*.

În mecanica mediilor continue o largă utilizare o are operaţia de diferenţiere de ordinul al doilea — rotorul transpus al cîmpului tensorial $\varepsilon(\boldsymbol{r})$. Acest cîmp tensorial

$$\text{Ink } \varepsilon = \text{Rot } (\text{Rot } \varepsilon)^* \tag{43.14}$$

are acelaşi rang ca şi cel iniţial şi se numeşte *incompatibilitatea cîmpului tensorial* $\varepsilon(\boldsymbol{r})$. Componentele lui sînt egale cu

$$(\text{Ink } \varepsilon)_{ij} = \delta_{ikm} \, \delta_{jln} \frac{\partial^2 \varepsilon_{mn}}{\partial x_k \, \partial x_l}. \tag{43.15}$$

§ 44. SIMETRIA EXTERIOARĂ ŞI REPREZENTAREA TENSORILOR ŞI PSEUDOTENSORILOR

Tensorii de material definesc proprietăţile cristalului. Fie un sistem cartezian de coordonate legat de un cristal. Setul de componente ale tensorului de material, în acest sistem de coor-

donate, caracterizează numeric proprietatea respectivă. Să supunem sistemul de coordonate unei transformări ortogonale. Componentele tensorului de material în „noul" sistem de coordonate, în general vorbind, nu mai sînt egale cu componentele lui de același nume din „vechiul" sistem. Însă dacă transformarea dată face parte din grupul de simetrie al cristalului, atunci componentele tensorului de material față de noul sistem vor coincide cu componentele din vechiul sistem. Într-adevăr, dacă două sisteme de coordonate sînt legate între ele printr-o transformare de simetrie a cristalului, poziția lor față de cristal este, în esență, aceeași. Prin urmare, *un tensor de material al unui cristal este invariant față de toate transformările de simetrie ale acestui cristal.*

Să formulăm această concluzie analitic. Fie **A** un tensor de material de rang r, iar $\| c_{i'k} \| = \| c_{i'k}(g) \|$ matricea unei transformări oarecare de simetrie a cristalului, g, a cărui proprietate este exprimată de acest tensor. Să supunem cristalul transformării g. În noul sistem de coordonate componentele tensorului capătă forma

$$A_{i'_1 \ldots i'_r} = c_{i'_1 k_1} \ldots c_{i'_r k_r} A_{k_1 \ldots k_r}. \qquad (44.1)$$

Însă deoarece g este o transformare de simetrie a cristalului, componentele tensorului, în noul sistem de coordonate, trebuie să coincidă cu componentele lui în vechiul sistem. Aceasta se poate scrie în felul următor

$$A_{i'_1 \ldots i'_r} = \delta_{i'_1 k_1} \ldots \delta_{i'_r k_r} A_{k_1 \ldots k_r}. \qquad (44.2)$$

Comparînd (44.1) cu (44.2), obținem

$$(c_{i'_1 k_1} \ldots c_{i'_r k_r} - \delta_{i'_1 k_1} \ldots \delta_{i'_r k_r}) A_{k_1 \ldots k_r} = 0, \qquad (44.3)$$

aceste 3^r egalități fiind necesar să fie satisfăcute pentru orice matrice $\| c_{i'k}(g) \|$, de îndată ce g este una dintre transformările de simetrie ale cristalului. Prin urmare, egalitățile (44.3) reprezintă un sistem de ecuații liniare, pe care trebuie să le satisfacă componentele tensorului **A**, dacă acest tensor descrie proprietățile cristalului.

Numărul de ecuații din sistemul (44.3) este egal cu ordinul grupului punctual al cristalului, înmulțit cu 3^r, numărul ecuațiilor independente fiind însă cu mult mai mic: dacă tensorul **A** satisface ecuația (44.3) pentru matricele care corespund generatoarelor (elementelor generatoare) ale grupului punctual al cris-

talului, atunci el satisface şi toate celelalte ecuaţii (relativ la generatoarele grupului punctual, v. § 5). Într-adevăr, dacă un tensor este invariant faţă de transformările g_1 şi g_2, el este, evident, invariant şi faţă de toate gradele şi produsele posibile ale acestor transformări.

Pentru un pseudotensor de material, **B**, formula (44.3) trebuie întrucîtva modificată. În noul sistem de coordonate componentele pseudotensorului **B** sînt egale cu

$$B_{i'_1\ldots i'_r} = \Delta c_{i'_1 k_1} \ldots c_{i'_r k_r} B_{k_1\ldots k_r}, \qquad (44.4)$$

Δ fiind determinantul matricei cosinuşilor $\|c_{ik'}\|$. Formula (44.2) rămîne valabilă şi pentru pseudotensori. Comparînd (44.2) cu (44.4), obţinem în loc de (44.3) formula

$$(\Delta c_{i'_1 k_1} \ldots c_{i'_r k_r} - \delta_{i'_1 k_r} \ldots \delta_{i'_r k_r}) B_{k_1\ldots k_r} = 0. \qquad (44.5)$$

Să examinăm mai întîi efectul existenţei în cristal a unui centru de simetrie asupra tensorilor de material. În acest caz tensorii de material trebuie să fie invarianţi faţă de inversie. Matricea cosinuşilor corespunzătoare inversiei este $c_{i'k} = -\delta_{i'k}$, iar determinantul ei, $\Delta = -1$. Înlocuind pe $c_{i'k}$ în formula (44.3), obţinem

$$[(-1)^r - 1]\, \delta_{i'_1 k_1} \ldots \delta_{i'_r k_r} A_{k_1\ldots k_r} = 0. \qquad (44.6)$$

Rezultatul depinde de faptul că rangul tensorului r este par sau impar. Pentru r par avem identitatea

$$0 \cdot A_{i'_1\ldots i'_r} = 0,$$

care este satisfăcută pentru orice tensor **A**. Prin urmare, toţi tensorii de rang par sînt invarianţi faţă de inversie, sau, cu alte cuvinte, au un centru de simetrie. Pentru r impar însă

$$-2A_{i'_1\ldots i'_r} = 0.$$

Aceasta înseamnă că în cazul existenţei unui centru de simetrie în cristal, toţi tensorii de material de rang impar se anulează; altfel spus, cristalele cu centru de simetrie nu posedă nici o proprietate caracterizată de tensorii de rang impar.

Dacă se ia nu un tensor, ci un pseudotensor, atunci, datorită faptului că în formula (44.5) intră factorul Δ, egal, în cazul inversiei, cu -1, în formula (44.6) va trebui schimbat r prin $r + 1$. De aceea, toţi pseudotensorii de material de rang impar au centru de simetrie; dimpotrivă, toţi pseudotensorii de material de rang par, pentru cristalele care au centru de simetrie, se anulează.

În legătură cu rezultatele obţinute în cadrul rezolvării acestei probleme este convenabil să introducem o nouă clasificare a tensorilor. Tensorii propriu-zişi de rang par şi pseudotensorii de rang impar sînt denumiţi *tensori de tip par*; toţi aceştia, după cum s-a arătat, sînt invarianţi faţă de inversie. Tensorii propriu-zişi de rang impar şi pseudotensorii de rang par se numesc *tensori de tip impar*; examinînd relaţia legăturii duale (§ 42), am văzut că una şi aceeaşi mărime poate fi considerată şi ca tensor propriu-zis şi ca pseudotensor. De aceea, afirmînd despre o mărime oarecare că ea este, să zicem, un pseudotensor, noi precizăm de fapt nu această mărime însăşi, ci numai metoda de a o scrie. Dimpotrivă, paritatea sau imparitatea constituie într-adevăr o proprietate esenţială propriu-zisă a mărimii. De exemplu, rotaţiile infinitezimale ale mediului continuu (v. § 49) pot fi descrise atît printr-un vector axial, $\overset{\circ}{\boldsymbol{\varphi}}$, cît şi folosind tensorul antisimetric — dualul său — de rangul doi, $\boldsymbol{\omega}$, însă în ambele procedee de exprimare a acestei mărimi utilizăm tensori tot de acelaşi tip, şi anume de tip par.

Pentru că toţi tensorii de material de tip par au simetrie centrală prin însăşi natura lor, ei nu „sesizează" dacă un cristal are sau nu centru de simetrie. Dacă adăugăm mintal operaţiilor de simetrie ale unui cristal o inversie (precum şi produsele dintre inversie şi toate operaţiile de simetrie), aceasta nu impune nici un fel de restricţii noi formei unui tensor de material de tip par. De aici rezultă că în raport cu simetria proprietăţilor descrise cu ajutorul tensorilor de tip par, cristalele se subîmpart nu în clase cristalografice, ci numai în clase Laue sau subsisteme (reamintim că grupurile punctuale ale tuturor claselor cu centru de simetrie făcînd parte dintr-un anumit subsistem, trec, după adăugarea la ele a elementelor generatoare de inversie, în grupul punctual al unicei clase cu centru de simetrie, a aceluiaşi subsistem). Astfel, numărul varietăţilor proprietăţilor de simetrie de tip par, pentru toate cristalele posibile, nu depăşeşte 11, iar dacă se iau în consideraţie şi mediile cu simetrie maximă —14.

Proprietăţi de tip impar pot avea, aşa cum s-a remarcat, numai cristalele cu centru de simetrie; numărul de varietăţi de simetrie a acestor proprietăţi nu depăşeşte, din această cauză, numărul de grupuri punctuale cristalografice, care nu posedă un

centru de simetrie, adică 21; dacă se consideră și grupurile limită, acest număr crește la 25.

Tensorul de material al unui cristal este invariant față de toate transformările de simetrie ale cristalului, însă, în general, nu este invariant numai față de ele. De pildă, un tensor de material de tip par este invariant față de inversie chiar și atunci cînd cristalul a cărui proprietate o descrie, nici nu are un centru de simetrie. Apoi, analizînd diferite aspecte din fizica cristalelor cu ajutorul principiului Curie, trebuie știut față de care anume dintre operațiile de simetrie este invariant unul sau altul dintre tensorii de cîmp. A. V. Șubnikov a introdus noțiunea de *simetrie a unui tensor*, utilizabilă atît în cazul tensorilor de material, cît și în cel al tensorilor de cîmp (Șubnikov, 1949; v. și Jeludev, 1957, și Kopțik, 1958) (ulterior, noțiunea a fost denumită *simetrie exterioară*, spre deosebire de cea internă): grupul de simetrie exterior al unui tensor este mulțimea tuturor transformărilor ortogonale față de care este invariant tensorul dat.

Metoda directă de determinare a simetriei exterioare a unui tensor a fost propusă de L. I. Sedov și V. V. Lohin (Lohin și Sedov — 1963 — sau Sedov — 1970 — anexa I; v. și Maloletkin și Fomin — 1972). Ei consideră ansamblul formulelor fundamentale ale teoriei simetriei exterioare a tensorilor, (44.3), ca pe un sistem de ecuații în elementele matriceale, $c_{i'k}$, tensorul **A** considerîndu-l dat. Fiecare soluție a acestui sistem este o matrice a transformării față de care este invariant tensorul **A**. Printre matricele care satisfac ecuația (44.3) pot fi și unele neortogonale; conform definiției simetriei exterioare a unui tensor, rezultă că matricele neortogonale nu trebuie luate deloc în considerație*. Matricele ortogonale rămase compun grupul simetriei exterioare a tensorului **A**.

În principiu, această metodă permite deducerea grupului simetriei exterioare a oricărui tensor, dat prin componentele sale într-un sistem de coordonate arbitrar, însă aplicarea lui nu este tocmai ușoară: ecuațiile (44.3) sînt liniare numai în raport cu componentele tensorului $A_{k_1 \ldots k_r}$, iar față de elementele matriceale $c_{i'k}$ acestea sînt niște ecuații de gradul r (r este rangul tensorului).

L. I. Sedov și V. V. Lohin au demonstrat că oricare grup cristalografic și limită poate fi definit ca un grup de simetrie exterioară al unui tensor oarecare sau ca intersecția (partea comună) grupurilor de simetrie exterioară a cîtorva tensori.

---

* Într-un articol al lui Lohin și Sedov (1963) sînt examinate toate grupurile de transformări care determină tensorul dat, chiar dacă în el intră și transformări neortogonale (întinderile, deplasările etc.). Pentru scopul nostru este suficient totuși să se examineze numai subgrupul ortogonal al acestui grup. Comparați cu Yakulenko (1972).

Tensorii de material ai cristalelor depind de temperatură, de frecvenţă şi de alţi parametri scalari. Din această cauză, în afară de simetriile exterioare ale tensorilor de material în fizica teoretică a cristalelor este studiată şi simetria exterioară a *funcţii-tensorilor de material* — funcţii-tensori de parametri scalari (asupra simetriei funcţii-tensorilor, v. şi Kopţik, 1966). Unui set de parametri scalari, $\omega_1, \omega_2, \ldots$ îi corespund tensori de material diferiţi, $\mathbf{A}(\omega_1)$, $\mathbf{A}(\omega_2), \ldots$ Grupurile lor de simetrie, $G(\mathbf{A}(\omega_1)), G(\mathbf{A}(\omega_2)), \ldots$ conţin, de regulă, aceleaşi elemente de simetrie, orientarea lor pentru diferiţi tensori putînd fi însă diferită. Se numeşte *grup de simetrie exterioară*, $G^{(\omega)}(\mathbf{A})$ al funcţiei-tensor de material, $\mathbf{A}(\omega)$, intersecţia (partea comună) acestor grupuri

$$G^{(\omega)}(\mathbf{A}) = G(\mathbf{A}(\omega_1)) \cap G(\mathbf{A}(\omega_2)) \cap \ldots = \bigcap_i G(\mathbf{A}(\omega_i)). \qquad (44.7)$$

În grupul $G^{(\omega)}(\mathbf{A})$ al simetriei exterioare pentru funcţia-tensor $\mathbf{A}(\omega)$ intră acele şi numai acele transformări care transformă tensorul $\mathbf{A}$ în sine însuşi, pentru orice valori ale parametrilor. Pe de altă parte, conform principiului Neumann, toate elementele unui grup punctual de simetrie al unui cristal, G, trebuie să intre în grupul de simetrie exterioară al tuturor tensorilor de material ai acestui cristal şi deci şi în grupul de simetrie al funcţii-tensorilor de material. De aici rezultă relaţia dedusă de Kopţik (1966) dintre grupurile de simetrie ale cristalului, G, tensorul de material $G(\mathbf{A})$, şi funcţia-tensor de material, $G^{(\omega)}(\mathbf{A})$,

$$G(\mathbf{A}) \supseteq G^{(\omega)}(\mathbf{A}) \supseteq G. \qquad (44.8)$$

Să examinăm cîteva exemple. Toţi vectorii de material ai cristalelor care au axă de simetrie sînt orientaţi după această axă şi, din această cauză, simetria, nu numai a fiecărui vector de material separat, ci şi mulţimea tuturor vectorilor de material posibili, este egală cu ∞m. Însă vectorii de material ai unui cristal din clasa m pot lua orice direcţie, care se află în planul de simetrie, ceea ce face ca simetria fiecărui vector în parte să fie, ca şi pînă acum, ∞m, totuşi simetria mulţimii lor este în total m.

Analog, fiecare tensor de material $[V^2]$ al unui cristal din orice clasă a sistemului monoclinic luat aparte are simetria mmm, însă întreaga mulţime a acestor tensori prezintă numai o singură axă de simetrie comună de ordinul doi şi un singur plan de simetrie comun, astfel încît grupul de simetrie al acestei mulţimi va fi $2/m$.

Să trecem la analiza metodelor de reprezentare a tensorilor și pseudotensorilor de orice rang. În § 22 sînt prezentate cele două tipuri de suprafețe, prin care se reprezintă tensorii simetrici de rangul doi: caracteristicile și suprafețele indicatoare. Pentru reprezentarea tensorilor de rang superior se utilizează de obicei numai suprafețele. În coordonate polare ecuația unei suprafețe a unui tensor simetric $\mathbf{T}$, de rangul p, are forma

$$r(\theta, \varphi) = T_{i_1 \ldots i_p} n_{i_1} \ldots n_{i_p} \tag{44.9}$$

$$(n_1 = \sin\theta \cos\varphi, \ n_2 = \sin\theta \sin\varphi, \ n_3 = \cos\theta).$$

Dacă se înlocuiesc în această ecuație componentele tensorului sau pseudotensorului $\mathbf{A}$, a cărui simetrie internă nu este egală cu $[V^p]$ sau $\varepsilon\,[V^p]$, forma suprafeței va fi afectată numai de partea simetrică a acestuia, $T_{i_1 \ldots i_p} = A_{(i_1 \ldots i_p)}$, deoarece

$$A_{i_1 \ldots i_p} n_{i_1} \ldots n_{i_p} = T_{i_1 \ldots i_p} n_{i_1} \ldots n_{i_p}.$$

Așa cum s-a remarcat (§§ 22, 24), suprafața unui tensor poate consta din părți albe (pozitive) și părți negre (negative): primele corespund valorilor pozitive ale lui r, celelalte, valorilor negative. Unele dintre suprafețele reprezentate în § 24 sînt suprafețe ale tensorilor de rang superior. De exemplu, suprafețele coeficientului de întindere (figurile 24.5 — 24.11) sînt, de fapt, suprafețe ale unui tensor de material, de rangul patru, $s^{(4}_{ijkl} = s_{(ijkl)}$, s fiind tensorul de deformabilitate elastică (v. §§ 51—53), iar suprafețele coeficientului de torsiune (figurile 24.6, 24.10, 24.11) sînt ale tensorului de material $Q_{ijkl} = 2\,(Z_{(ik}\delta_{jl)} - s_{(ijkl)})$, unde $Z_{ik} = s_{imkm}$ (comparați cu formulele (54.20) și (54.21)). Un mare număr de suprafețe de acest fel precum și secțiunile și proiecțiile lor stereografice (v. § 24) sînt date în capitolele ce urmează: figurile 54.3 — 54.10, 56.4, 58.1 — 58.3, 75.1 ș.a.

Să comparăm suprafețele tensorilor de tip par cu cele ale tensorilor de tip impar. Deoarece tensorii de tip par au centru de simetrie, la fel sînt și suprafețele lor: $r(\mathbf{n}) = r(-\mathbf{n})$. Din această cauză, orice diametru al suprafeței unui tensor de tip par constă din două raze egale ca mărime, corespunzînd aceluiași semn (fig. 44.1, a); simetria lui este ∞/mm.

Tensorii de tip impar sînt anticentrosimetrici: prin inversie ei își schimbă semnul (de acest fapt este legată antisimetria acestor suprafețe; vezi §§ 67, 68); la fel sînt și suprafețele lor: $r(\mathbf{n}) = -r(-\mathbf{n})$. Orice diametru al unei astfel de suprafețe constă

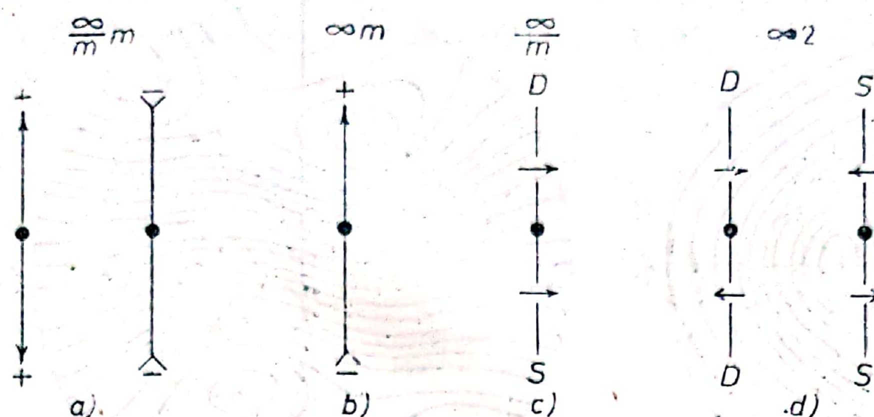


Fig. 44.1. Diametrele suprafeţelor : *a*) a unui tensor propriu-zis de tip par ; *b*) a unui tensor propriu-zis de tip impar ; *c*) a unui pseudotensor de tip par ; *d*) a unui pseudotensor de tip impar. Diametrele *b*), *c*) şi *d*) reprezintă direcţiile polară, axială şi, respectiv, elicoidală. Punctul desemnează centrul suprafeţei. Semnele plus şi minus corespund culorii albe, respectiv, negre, la capătul diametrului dat, iar literele *D* şi *S* rotaţiei drepte, respectiv, stîngi. V. Şubnikov (1958, fig. 117) şi Şubnikov şi Kopţik (1972, fig. 74).

din două raze egale ca mărime, dar de semne contrare (fig. 44.1, b) ; simetria lui este ∞m. Direcţiile din cristal a căror simetrie nu depăşeşte ∞m se numesc *direcţii polare* (v. § 3 şi anexa C). Din principiul Curie rezultă că diametrele suprafeţelor tensorilor de material de tip impar pot fi diferite de zero numai după acele direcţii care în cristalul dat sînt direcţii polare. Două proiecţii stereografice şi o secţiune a suprafeţei efectului piezoelectric longitudinal dintr-un cristal de turmalină (clasa $3m$) sînt date în figura 44.2 ; aceasta este suprafaţa tensorului de material de rangul trei, $f_{ijk} = d_{(ijk)}$, unde **d** este tensorul coeficienţilor piezoelectrici (v. § 58).

Suprafeţele pseudotensorilor simetrici sînt date tot de ecuaţia (44.9), însă razele vectoare ale acestor suprafeţe se transformă evident, nu după o lege vectorială, ci după una pseudovectorială, adică sînt vectori axiali. De aceea, fiecărui punct al suprafeţei pseudotensorului i se atribuie nu un semn (ca punctelor suprafeţelor tensorilor propriu-zişi), ci o rotaţie în sensul în care se roteşte raza vectoare axială a punctului considerat. Convenim să numim acest punct al suprafeţei pseudotensorului *punct dextrogir*, dacă, privindu-l din exteriorul suprafeţei, rotaţia ne apare în sens contrar mersului acelor de ceas (respectiv, privindu-l dinăuntru, adică de-a lungul razei vectoare — în sensul mersului acelor de ceas) şi *punct levogir*, în cazul contrar.

Să comparăm acum suprafeţele unui pseudotensor de tip par cu suprafeţele unuia de tip impar. Suprafeţele pseudotensorilor

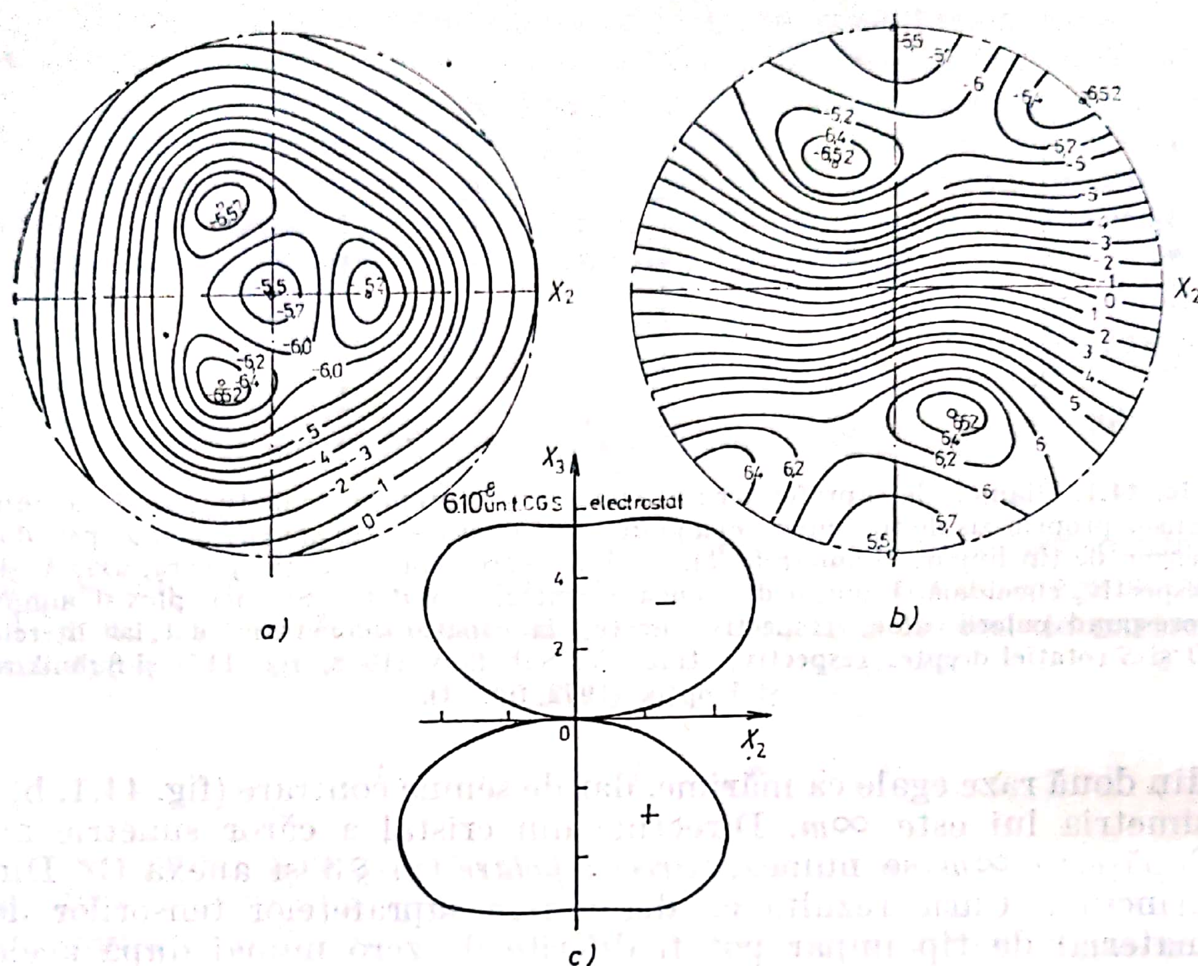


Fig. 44.2. Suprafaţa efectului piezoelectric longitudinal într-un cristal de turmalină (clasa $3m$) — exemplu de suprafaţă a unui tensor de tip impar : *a*) proiecţia stereografică, din centrul proiecţiei iese axa X_3 — [0001] ; *b*) aceeaşi suprafaţă, numai că din centru iese axa X_1 — $[2\bar{1}\bar{1}0]$; în 10^{-8} unităţi CGSE ; c) secţiune a suprafeţei cu planul X_2X_3 — (2110). Grupul de simetrie a suprafeţei este $3m$, grupul de antisimetrie fiind $3'm$ (v. § 68) (Butabaev, 1973).

de tip par (adică de rang impar) au centru de simetrie. Înseamnă că fiecare diametru al unei astfel de suprafeţe constă din două raze egale ca mărime şi cu acelaşi sens de rotaţie (fig. 44.1, c) ; simetria lui este ∞/m. Direcţiile din cristal ale căror simetrii nu depăşesc ∞/m se numesc *direcţii axiale*, astfel încît diametrele suprafeţelor pseudotensorilor de material, de tip par, sînt diferite de zero numai în direcţiile axiale. Un exemplu de suprafaţă de acest tip este dat în figura 44.3.

Diametrele suprafeţelor de tip impar constau din raze egale ca lungime, dar cu sensuri de rotaţie contrare (fig. 44.1, d) ; simetria lor este $\infty 2$. Direcţiile din cristale avînd această simetrie sau una mai mică se numesc *direcţii elicoidale* ; diametrele suprafeţelor pseudotensorilor de material de tip impar sînt diferite de zero numai după direcţiile elicoidale. Un exemplu de suprafaţă a unui pseudotensor de tip impar este dat în figura 44.4. Aceasta

este suprafaţa unui pseudotensor de rangul doi, cu simetria $\bar{4}2m$, a cărui matrice, în sistemul $X_1X_2X_3$, are forma

$$\|G_{ij}\| = \begin{Vmatrix} -G & 0 & 0 \\ 0 & G & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix}, \tag{44.10}$$

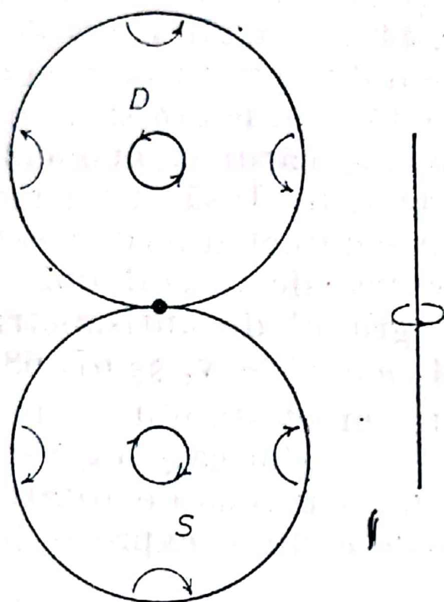


Fig. 44.3. Suprafaţa unui vector axial — exemplu de suprafaţă a unui pseudotensor de tip par. Simetria suprafeţei este ∞/m. Săgeţile circulare arată sensul de rotaţie. Cu literele D şi S sînt notate părţile suprafeţei care constau din puncte drepte sau respectiv, stîngi. În dreapta, vectorul axial cu lungimea şi sensul corespunzător. De comparat cu suprafaţa unui vector polar, figura 22.3.

dacă rotaţiei la dreapta i se atribuie semnul minus, iar celei la stînga semnul plus. Acest pseudotensor reprezintă activitatea optică a cristalelor din clasele $\bar{4}2m$, $\bar{4}$, $mm2$ şi m, în particular, rotirea planului de polarizare a luminii în cristalele claselor $\bar{4}2m$

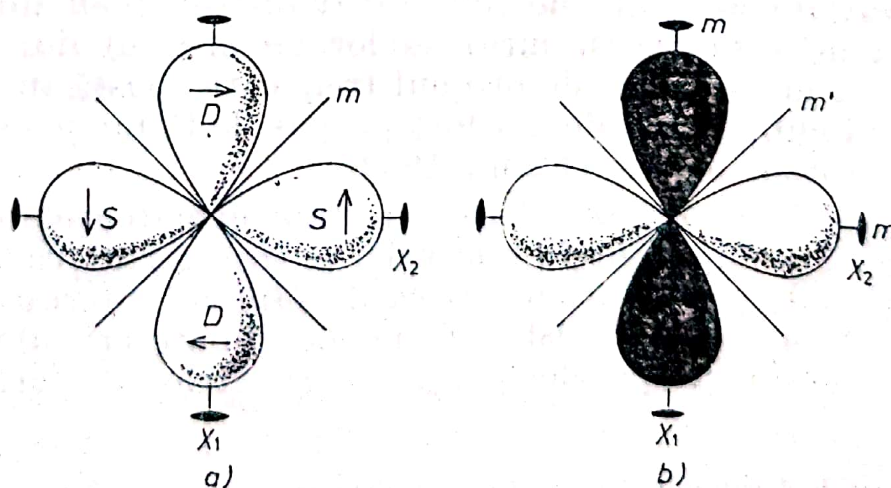


Fig. 44.4. Suprafeţe : *a*) a unui pseudotensor simetric de rangul doi, de simetrie $\bar{4}2m$; *b*) a unui tensor simetric de rangul doi cu aceleaşi componente — simetria lui este *mmm*, antisimetria fiind $4'/mmm'$, v. § 68 (după Şubnikov, 1951).

și $\bar{4}$ atunci cînd indicii principali de refracție, N_o și N_e coincid (v. § 81)*.

Dacă toate componentele cu același nume ale unui tensor propriu-zis și ale unui pseudotensor de același rang cu tensorul coincid, atunci suprafețele lor au aceeași figură. Deoarece însă razele vectoare care dau naștere acestor suprafețe au semnificații diferite precum și simetrii diferite, rezultă că atît sensul cît și simetria suprafețelor înseși vor fi, de asemenea, diferite. Aceasta se vede, de exemplu, în cazul comparării suprafețelor unui vector polar (v. fig. 22.3) cu cea a unui vector axial (fig. 44.3). Un alt exemplu: aceleași contururi ca și ale suprafeței pseudotensorului de rangul doi cu simetria $\bar{4}2m$, reprezentată în figura 44.4, a, le are și suprafața unui tensor propriu-zis de rangul doi, ale cărui componente sînt date de aceeași matrice, (44.10) (fig. 44.4, b). Însă atît simetria acestui tensor cît și suprafața lui sînt complet diferite: este grupul *mmm*, ca pentru orice tensor simetric de rangul doi cu trei valori proprii diferite ($-G$, G și 0) (grupul de antisimetrie al acestui tensor și al suprafeței lui fiind $4'/mmm'$ — v. §§ 67, 68).

Prin urmare, simetria suprafețelor este corect stabilită numai în cazul în care se ține seama de faptul că punctelor care o constituie li se atribuie o anumită culoare (semn), sau sens de rotație, adică de faptul că aceste suprafețe reprezintă, după expresia lui A. V. Șubnikov (1951), figuri materiale.

§ 45. METODA VERIFICĂRII DIRECTE

În acest paragraf va fi expus cel mai comod procedeu de deducere a condițiilor necesare pe care trebuie să le satisfacă un tensor invariant atît față de reflectarea într-un plan de simetrie cît și față de rotațiile în jurul axelor de ordinul doi și patru, precum și în jurul axelor de ordinul trei, care există în cristalele din sistemul cubic. Procedeul a fost propus de Fumi și se numește *metoda verificării directe* (Fumi, 1952).

În această metodă se folosesc în fond următoarele două circumstanțe: 1) componentele tensorilor se transformă ca și produsele componentelor vectorilor; 2) că de fapt ne interesează tipul tensorului de material în sistemul de coordonate cristalofizic, iar acesta este construit pe elementele de simetrie ale cristalului;

* Rotației la dreapta îi corespund, în definiția noastră, regiunile tot din dreapta ale suprafeței. Totodată, conform definiției folosite în optică, în cazul în care planul de polarizare este rotit spre dreapta, rotația se consideră levogiră (v. § 81), corespunzînd valorilor negative ale componentei normale a pseudotensorului G_{ij}. Alegerea semnului matricei (44.10) este în concordanță tocmai cu acest fapt.

rezultă că atît axele de simetrie cît și normalele la planul de simetrie coincid cu axele de coordonate, cu bisectoarele unghiurilor dintre ele etc.

Să analizăm, de pildă, cum se vor transforma componentele unui vector la o rotație a sistemului de coordonate cu 90° în jurul axei X_3. Dacă notăm versorii sistemului de coordonate „vechi" cu $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$, iar pe cei ai sistemului „nou" cu $\boldsymbol{e}_{1'}, \boldsymbol{e}_{2'}, \boldsymbol{e}_{3'}$, atunci se poate scrie

$$x\boldsymbol{e}_1 + y\boldsymbol{e}_2 + z\boldsymbol{e}_3 = x'\,\boldsymbol{e}_{1'} + y'\,\boldsymbol{e}_{2'} + z'\,\boldsymbol{e}_{3'},$$

x, y, z fiind cele trei componente ale vectorului.

Matricea cosinușilor pentru rotația considerată este

$$\|c_{i'k}\| = \begin{Vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix},$$

„Noii" versori, dați de formula

$$\boldsymbol{e}_{i'} = c_{i'k}\,\boldsymbol{e}_k$$

vor fi

$$\boldsymbol{e}_{1'} = \boldsymbol{e}_{2'},\ \boldsymbol{e}_{2'} = -\,\boldsymbol{e}_{1'}\ \ \boldsymbol{e}_{3'} = \boldsymbol{e}_3.$$

Prin urmare,

$$x\boldsymbol{e}_1 + y\boldsymbol{e}_2 + z\boldsymbol{e}_3 = x'\,\boldsymbol{e}_2 - y'\,\boldsymbol{e}_1 + z'\,\boldsymbol{e}_3.$$

Întrucît versorii sînt liniar independenți, această ecuație este satisfăcută numai atunci cînd coeficienții versorilor corespunzători sînt egali cu

$$x' = y,\ y' = -\,x,\ z' = z.$$

(Același rezultat s-ar fi obținut imediat, dacă am fi aplicat matricea $\|c_{i'k}\|$ direct componentelor, nu versorilor; am ales o cale mai lungă, pentru ca în paragraful următor să aplicăm operații analoage coordonatelor ciclice, care, spre deosebire de coordonatele carteziene, nu se transformă în același fel cu vectorii ciclici ai bazei, care le corespund). Se vede că în acest caz componenta vectorului fie rămîne neschimbată, fie trece într-o altă componentă, schimbîndu-și eventual semnul. Aceasta se datorește formei matricei cosinușilor: toate elementele ei sînt întregi, fiind egale cu +1, —1 sau 0. Metoda verificării directe a lui Fumi este adec-

vată numai acelor operaţii de simetrie, care sînt definite prin matrice ale cosinuşilor, egale cu numere întregi.

Matricea cosinuşilor va fi egală cu un număr întreg numai în cazul rotaţiilor speciale, anume rotaţiile ale căror axe sînt dispuse într-un mod bine determinat faţă de sistemul de coordonate. În particular, pentru rotaţia cu 120° (axă de ordinul trei), matricea cosinuşilor va fi un număr întreg dacă axa de rotaţie face unghiuri egale cu axele X_1, X_2 şi X_3, nemaifiind însă un număr întreg dacă această axă coincide cu vreuna dintre axele de coordonate. În tabelul 45.1 sînt cuprinse toate cazurile unor asemenea rotaţii, ce prezintă interes practic.

Tabelul 45.1

Transformările indicilor, folosite în metoda verificării directe

$g =$	$\bar{1}$	2_z	2_x	2_y	2_{xy}	m_z	m_x	m_y	m_{xy}	4_z	$\bar{4}_z$	3_{xyz}
$x' =$	$-x$	$-x$	x	$-x$	y	x	$-x$	x	$-y$	y	$-y$	y
$y' =$	$-y$	$-y$	$-y$	y	x	y	y	$-y$	$-x$	$-x$	x	
$z' =$	$-z$	z	$-z$	$-z$	$-z$	$-z$	z	z	z	z	$-z$	x

Observaţie. Indicii x, y, z arată că axa de simetrie (sau normala la planul de simetrie) coincide cu axele X_1, X_2 şi X_3. Indicele xy arată că axa este orientată după bisectoarea unghiului dintre axele X_1 şi X_2, iar indicele xyz că axa este orientată de-a lungul dreptei care face cu axele X_1, X_2 şi X_3 unghiuri egale.

Vom examina acum cum se transformă, în cazul aceleiaşi rotaţii componentele tensorului de rangul doi. Pentru a ne folosi de faptul că ele se transformă la fel cu produsele dintre componentele vectorilor, vom nota componenta avînd indicele 11, cu simbolul $[xx]$, pe cea avînd indicii 12 cu $[xy]$ ş.a.m.d. Deoarece nu presupunem că tensorul este simetric în raport cu indicii săi (de exemplu, $[xy] \neq [yx]$), trebuie să fim foarte atenţi cu ordinea „factorilor" din simbolurile componentelor, astfel încît nu cumva să îi permutăm arbitrar. În rest, aceste simboluri pot fi tratate ca produse obişnuite. Dacă componentele unui vector, în cazul operaţiei 4_z suferă transformarea

$$x' = y \quad y' = -x, \quad z' = z,$$

atunci atît componentele tensorului cît şi produsele lor se vor transforma astfel

$$[xx]' = [yy], \; [yx]' = -[xy], \; [zx]' = [zy],$$

$$[xy]' = -[yx], \; [yy]' = [xx], \; [zy]' = -[zx],$$

$$[xz]' = [yz], \; [yz]' = -[xz], \; [zz]' = [zz].$$

Procedînd la fel pentru operaţiile 2_z, 2_x, şi 3_{xyz}, întocmim următorul tabel

$g =$	2_z	2_x	4_z	3_{xyz}	$g =$	2_z	2_x	4_z	3_{xyz}
$[xx]' =$	$[xx]$	$[xx]$	$[yy]$	$[yy]$	$[zx]' =$	$-[zx]$	$-[zx]$	$[zy]$	$[xy]$
$[yy]' =$	$[yy]$	$[yy]$	$[xx]$	$[zz]$	$[xz]' =$	$-[xz]$	$-[xz]$	$[yz]$	$[yx]$
$[zz]' =$	$[zz]$	$[zz]$	$[zz]$	$[xx]$	$[xy]' =$	$[xy]$	$-[xy]$	$-[yx]$	$[yz]$
$[yz]' =$	$-[yz]$	$[yz]$	$-[xz]$	$[zx]$	$[yx]' =$	$[yx]$	$-[yx]$	$-[xy]$	$[zy]$
$[zy]' =$	$-[zy]$	$[zy]$	$-[zx]$	$[xz]$					

Dacă cristalul aparţine clasei 2, axa 2 fiind paralelă cu X_3, atunci componentele tensorului de material nu trebuie să se modifice în urma aplicării operaţiei 2_z. Din această cauză sîntem îndreptăţiţi să punem semne de egalitate între indicii care se află pe aceeaşi linie, în coloanele întîi şi a doua ale tabelului. Însă o egalitate de forma $[yz] = [-yz]$ este satisfăcută numai pentru $[yz] = 0$. Egalităţile banale, de forma $[xx] = [xx]$ sînt valabile pentru orice valori ale componentelor respective. Rezultă deci că tensorul de material de rangul doi, pentru cristalele din clasa 2, va fi

$$\|T_{ij}\| = \begin{Vmatrix} T_{11} & T_{12} & 0 \\ T_{21} & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{Vmatrix}.$$

Tensorul examinat este de tip par şi din această cauză, aşa cum s-a arătat în paragraful precedent, el trebuie să aibă aceeaşi formă şi pentru cristalele din celelalte clase care intră în acelaşi subsistem: m şi $2/m$.

Să analizăm acum clasa 4. Dat fiind că printre operaţiile grupului 4 există şi operaţia 2_z, se pot egala cu zero dintr-odată componentele $[yz]$, $[zy]$, $[zx]$ şi $[xz]$ (însă s-ar fi putut ca acestea să nu ne folosească; astfel, comparînd, de pildă, egalităţile $[yz] = [xz]$ şi $[xz] = -[yz]$, apare evident că $[yz] = [xz] = 0$). Pentru celelalte componente avem

$$[xx] = [yy], \ [xy] = -[yx].$$

Prin urmare, pentru clasa 4 (precum şi pentru clasele $\bar{4}$ şi $4/m$) tensorul de material de rangul doi este

$$\|T_{ij}\| = \begin{Vmatrix} T_{11} & T_{12} & 0 \\ -T_{12} & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{Vmatrix}.$$

Pînă acum am examinat grupurile cu o singură generatoare. Pentru grupurile cu mai multe generatoare, condiția de egalitate a componentelor care se transformă și a celor care nu se transformă trebuie să fie satisfăcută pentru fiecare generatoare în parte. În tabelul 45.2 sînt date cele mai indicate seturi de generatoare pentru a fi folosite în metoda verificării directe.

Tabelul 45.2

Generatoarele (care generează elemente) grupurilor cristalografice și grupurilor limită

Grupul	Generatoarele	Grupul	Generatoarele
$\bar{1}$	$\bar{1}$	$4mm$	$4_z,\ m_x$
$2(2 \parallel X_2)$	2_y	$\bar{4}2m\ (2 \parallel X_1)$	$\bar{4}_z,\ 2_x$
$2(2 \parallel X_3)$	2_z	$\bar{4}m2\ (m \perp X_1)$	$\bar{4}_z,\ m_x$
$m(m \perp X_2)$	m_y	$4/mmm$	$4_z,\ 2_x,\ \bar{1}$
$m(m \perp X_3)$	m_z	6	6_z
$2/m\ (2 \parallel X_2)$	$2_y,\ \bar{1}$	$\bar{6}$	$\bar{6}_z$
$2/m\ (2 \parallel X_3)$	$2_z,\ \bar{1}$	$6/m$	$6_z,\ \bar{1}$
222	$2_z,\ 2_x$	622	$6_z,\ 2_x$
$mm2$	$2_z,\ m_x$	$6mm$	$6_z,\ m_x$
mmm	$2_z,\ 2_x,\ \bar{1}$	$\bar{6}m2(m \perp X_1)$	$\bar{6}_z,\ m_x$
3	3_z	$\bar{6}2m\ (2 \parallel X_1)$	$\bar{6}_z,\ 2_x$
$\bar{3}$	$3_z,\ \bar{1}$	$6/mmm$	$6_z,\ 2_x,\ \bar{1}$
$32(2 \parallel X_1)$	$3_z,\ 2_x$	23	$2_z,\ 3_{xyz}$
$32(2 \parallel X_2)$	$3_z,\ 2_y$	$m3$	$2_z,\ 3_{xyz},\ \bar{1}$
$3m\ (m \perp X_1)$	$3_z,\ m_x$	432	$4_z,\ 3_{xyz}$
$3m\ (m \perp X_2)$	$3_z,\ m_y$	$\bar{4}3m$	$\bar{4}_z,\ 3_{xyz}$
$\bar{3}m\ (2 \parallel X_1)$	$3_z,\ 2_x,\ \bar{1}$	$m3m$	$4_z,\ 3_{xyz},\ \bar{1}$
$\bar{3}m\ (2 \parallel X_2)$	$3_z,\ 2_y,\ \bar{1}$	∞	∞_z
4	4_z	∞/m	$\infty_z,\ \bar{1}$
$\bar{4}$	$\bar{4}_z$	$\infty 2$	$\infty_z,\ 2_x$
$4/m$	$4_z,\ \bar{1}$	∞m	$\infty_z,\ m_x$
422	$4_z,\ 2_x$	∞/mm	$\infty_z,\ 2_x,\ \bar{1}$

Vom aplica această regulă pentru determinarea formei tensorului de material de rangul doi, pentru clasele 222, 422, 23 și 432 (și deci pentru toate clasele subsistemelor corespunzătoare).

Pentru clasa 222, în urma verificării invarianței față de 2_z, rămîn componentele $[xx]$, $[yy]$, $[zz]$, $[xy]$ și $[yx]$. Criteriul invarianței față de 2_x elimină ultimele două componente. Ca rezultat se obține

$$\|T_{ij}\| = \left\| \begin{matrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{matrix} \right\| .$$

Pentru clasa 422, după aplicarea criteriului invarianței față de 4_z, rămîn componentele $[xx] = [yy]$, $[zz]$, $[xy] = -[yx]$. Criteriul invarianței față de 2_x elimină ultima pereche de componente, astfel încît

$$\| T_{ij} \| = \begin{Vmatrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{Vmatrix}.$$

Pentru clasa 23, studiind efectul operației 3_{xyz} asupra componentelor care rămîn în urma selecționării după 2_z, obținem egalitățile

$$[xx] = [zz] = [yy], \ [xy] = [zx] = 0, \ [yx] = [xz] = 0.$$

De aici,

$$\| T_{ij} \| = \begin{Vmatrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{11} \end{Vmatrix}.$$

Pentru clasa 432 obținem același rezultat, examinînd efectul aplicării operației 3_{xyz} asupra componentelor care rămîn după selecționarea pentru 4_z.

Exemplul analizat arată, mai întîi, că grupul cu simetrie exterioară a unui tensor se dovedește mai larg decît grupul de simetrie al cristalului, grup față de care trebuie să fie invariant tensorul dat (problema nu se reduce numai la adăugarea centrului de simetrie : impunînd tensorului condiția invarianței în raport cu grupul 23, am obținut un tensor a cărui simetrie este superioară nu numai lui $m3$, ci mult mai înaltă, anume $\infty\infty m$).

În al doilea rînd, exemplul analizat pune în evidență legătura dintre simetria exterioară și simetria internă a unui tensor. Noi am analizat tensorul cu simetrie internă V^2, adică ne-am preocupat dacă el este simetric (sau antisimetric) în raport cu indicii. Pentru clasele Laue $2/m$ și $4/m$ am și obținut un tensor cu simetrie internă, V^2, pe cînd în cazul claselor Laue mmm, $4/mmm$, $m3$ și $m3m$ condițiile de invarianță au dus la creșterea simetriei interne a tensorului pînă la $[V^2]$, acesta devenind simetric în raport cu indicii săi. Astfel, simetria exterioară a unui tensor predetermină uneori simetria sa internă.

Aplicarea metodei verificării directe tensorilor de rang mai mare se face la fel de simplu. Singura dificultate este legată de faptul că ei au un număr mai mare de componente, astfel încît

problema devine cu mult mai laborioasă, chiar dacă nu şi mai dificilă. Această dificultate poate fi într-o oarecare măsură evitată, dacă nu se scriu toate permutările indicilor : este clar, de exemplu, că avînd $[xz]' = [yz]$, atunci şi $[zx]' = [zy]$.

Să luăm un tensor de rangul trei şi să deducem ce formă va căpăta el pentru cristalele din clasele $\bar{4}2m$ şi 422. Pentru aceasta este suficient să se verifice efectul ce îl are asupra lui aplicarea generatoarelor $\bar{4}_z$ şi 2_x pentru clasa $\bar{4}2m$ şi 4_z şi 2_x pentru clasa 422 (vezi tabelul 45.2). În acest scop vom întocmi tabelul :

$g =$	2_x	$\bar{4}_z$	4_z	$g =$	2_x	$\bar{4}_z$	4_z
$[xxx]' =$	$[xxx]$	$-[yyy]$	$[yyy]$	$[yyz]' =$	$-[yyz]$	$-[xxz]$	$[xxz]$
$[yyy]' =$	$-[yyy]$	$[xxx]$	$-[xxx]$	$[yyx]' =$	$[yyx]$	$-[xxy]$	$[xxy]$
$[zzz]' =$	$-[zzz]$	$-[zzz]$	$[zzz]$	$[zzx]' =$	$[zzx]$	$-[zzy]$	$[zzy]$
$[xxy]' =$	$-[xxy]$	$[yyx]$	$-[yyx]$	$[zzy]' =$	$-[zzy]$	$[zzx]$	$-[zzx]$
$[xxz]' =$	$-[xxz]$	$-[yyz]$	$[yyz]$	$[xyz]' =$	$[xyz[$	$[yxz]$	$-[yxz]$

Necesitatea invarianței față de 2_x impune anularea componentelor $[yyy]$, $[zzz]$, $[xxy]$, $[xxz]$, $[yyz]$, $[zzy]$, precum şi a tuturor componentelor care se deosebesc de acestea numai prin permutarea indicilor. Componentele care rămîn le verificăm dacă sînt invariante față de $\bar{4}_z$ şi obținem $[xxx] = [yyy] = 0$, $[yyx] = = [xxy] = 0$, $[zzx] = [zzy] = 0$, $[xyz] = [yxz]$, ultima egalitate fiind valabilă pentru orice permutare a indicilor, făcută simultan, în partea sa din dreapta cît şi din stînga. Prin urmare, în cazul unui tensor $\mathbf{g}$, cu simetria internă V^3, invariant față de grupul $\bar{4}2m$, se anulează numai următoarele componente

$$g_{123} = g_{213},\ g_{231} = g_{132},\ g_{312} = g_{321},$$

adică în total şase componente, trei dintre ele fiind independente. Pentru un tensor $\mathbf{d}$, cu simetria internă $V[V^2]$, ale cărui componente satisfac condiția $d_{ikl}=d_{ilk}$, numărul componentelor independente se reduce la două

$$d_{123} = d_{213} = d_{231} = d_{132},\ d_{312} = d_{321}.$$

În sfîrşit, tensorul $\mathbf{f}$, cu simetria internă $[V^3]$ are numai o singură componentă independentă

$$f_{123} = f_{213} = f_{231} = f_{132} = f_{312} = f_{321}.$$

Pentru a găsi tensorii de rangul trei, invarianți față de grupul 422, verificăm componentele care mai rămîn neînlăturate

după operaţia 2_x în privinţa invarianţei faţă de 4_z. Obţinem egalităţile

$$[xxx] = -[yyy] = 0, \quad [yyx] = -[xxy] = 0,$$
$$[zzz] = -[zzy] = 0, \quad [xyz] = -[yxz].$$

Judecînd ca şi în cazul precedent, obţinem faptul că tensorii g, invarianţi faţă de grupul 422, cu simetria internă V^3, au şase componente diferite de zero

$$g_{123} = -g_{213}, \; g_{231} = -g_{132}, \; g_{312} = -g_{321},$$

trei dintre ele fiind independente. Tensorii **d**, cu simetria internă $V[V^2]$ au numai patru componente

$$d_{123} = d_{132} = -d_{213} = -d_{231},$$

dintre ele numai una fiind independentă. În sfîrşit, tensorii cu simetria internă $[V^3]$ vor fi, în acest caz, identic egali cu zero.

Astfel, aproape fără a face vreun calcul, se determină forma tensorilor de material de orice rang pentru cristalele din sistemele monoclinic, rombic, tetragonal şi cubic. Cele 25 de tipuri de tensori şi de pseudotensori de material, de la rangul zero pînă la rangul şase, inclusiv, sînt date în anexa E.

§ 46. COORDONATE CICLICE. TEOREMA LUI HERMANN

Metoda verificării directe, expusă în paragraful precedent, nu permite depistarea tensorilor invarianţi faţă de grupul sistemelor trigonal şi hexagonal, precum şi faţă de grupurile limită de simetrie. Pentru realizarea acestor probleme sînt necesare metode mai complexe, dintre care una — metoda verificării directe în coordonate ciclice — va fi analizată aici.

Vom supune analizei vectorii ciclici ai bazei

$$\boldsymbol{j} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{e}_1 + \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2), \quad \bar{\boldsymbol{j}} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{e}_1 - \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2), \quad \boldsymbol{e} = \boldsymbol{e}_3. \qquad (46.1)$$

Doi dintre ei sînt complex-conjugaţi, ceea ce s-a notat prin supralinierea vectorului $\bar{\boldsymbol{j}}$. Ei sînt însă liniar independenţi, deoarece*

$$(\boldsymbol{j} \times \bar{\boldsymbol{j}}) \cdot \boldsymbol{e} = -\frac{1}{2}\mathrm{i} \neq 0,$$

---

* Toate operaţiile cu vectori complecşi vor fi efectuate la fel cu operaţiile cu vectori reali, considerîndu-l pe i drept un coeficient obişnuit (astfel încît $\mathrm{i}^2 = -1$). Remarcăm că în algebra liniară produsul scalar al vectorilor complecşi se defineşte în alt mod.

de aceea, ei pot fi folosiţi drept bază. Inversarea formulelor (46.1) are forma

$$e_1 = j + \bar{j},\ e_2 = -\mathrm{i}(j - \bar{j}),\ e_3 = e. \tag{46.2}$$

Să scriem unul şi acelaşi vector real în baza carteziană şi în baza ciclică

$$xe_1 + ye_2 + ze_3 = \xi j + \bar{\xi}\bar{j} + ze.$$

Înlocuind pe e_1 şi e_2 cu expresiile lor (46.2) şi comparînd coeficienţii vectorilor identici, găsim

$$\xi = x - \mathrm{i}y,\ \bar{\xi} = x + \mathrm{i}y,\ z = z. \tag{46.3}$$

Prin urmare, şi aici supraliniereа are sensul de complex conjugat.

Să rotim acum sistemul de coordonate în jurul axei X_3 cu unghiul φ. „Noii" vectori cartezieni ai bazei sînt egali cu

$$\begin{aligned} e_{1'} &= e_1 \cos\varphi + e_2 \sin\varphi, \\ e_{2'} &= -e_1 \sin\varphi + e_2 \cos\varphi, \\ e_{3'} &= e_3. \end{aligned} \tag{46.4}$$

Lor le corespunde şi o „nouă" bază ciclică

$$j' = \frac{1}{2}(e_{1'} + \mathrm{i}e_{2'}),\ \bar{j}' = \frac{1}{2}(e_{1'} - \mathrm{i}e_{2'}),\ e' = e_{3'}. \tag{46.5}$$

Pentru a obţine legea de transformare a vectorilor ciclici ai bazei în cazul unei astfel de rotaţii a sistemului de coordonate, vom exprima noii versori cartezieni prin versorii cartezieni vechi, iar pe aceştia din urmă cu ajutorul formulelor (46.2), prin vechii vectori ciclici ai bazei. Atunci vom obţine

$$j' = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} j,\ \bar{j}' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\bar{j},\ e' = e. \tag{46.6}$$

De aici vom găsi legea de transformare a componentelor. Deoarece

$$\xi j + \bar{\xi}\bar{j} + ze = \xi' j'\ \bar{\xi}'\bar{j}' + z' e',$$

rezultă că

$$\xi' = e^{i\varphi}\,\xi, \quad \overline{\xi'} = e^{-i\varphi}\,\overline{\xi}, \; z' = z. \tag{46.7}$$

Dacă componentei ξ îi atribuim indicele 1, componentei $\overline{\xi}$, indicele -1, iar componentei z, indicele 0, atunci legea de transformare a componentelor ciclice (însă nu a vectorilor bazei) la o rotație în jurul axei X_3, se poate scrie cu ajutorul matricei $\| c_{k'l} \|$

$$c_{k'l} = e^{ik'\varphi}\,\delta_{k'l} = e^{il\varphi}\,\delta_{k'l}, \tag{46.8}$$

sub forma

$$A_{k'} = c_{k'l}\,A_l = e^{il\varphi}\,\delta_{k'l}\,A_l. \tag{46.9}$$

În mod corespunzător, legea de transformare a componentelor unui tensor $\mathbf{A}$, de rang r, la rotația cu unghiul φ în jurul axei X_3 capătă forma

$$A_{k'_1 \dots k'_r} = \exp\,[i(l_1 + \dots + l_r)\,\varphi]\;\delta_{k'_1 l_1} \dots \delta_{k'_r l_r}\,A_{l_1 \dots l_r}. \tag{46.10}$$

Dacă rotația în jurul axei X_3 reprezintă rotația unitară în jurul unei axe de simetrie de ordinul N, aunci $\varphi = 2\pi/N$, iar

$$c_{k'l} = \exp\left(\frac{2\pi i}{N}\,l\right)\,\delta_{k'l}. \tag{46.11}$$

Să presupunem acum că tensorul $\mathbf{A}$, de rang r este dat prin componentele sale $A_{l_1 \dots l_r}$, din sistemul ciclic de coordonate. Să formulăm condițiile pe care trebuie să le satisfacă aceste componente, pentru ca tensorul $\mathbf{A}$ să fie invariant față de grupul N (adică față de rotațiile în jurul axei de simetrie de ordinul N). Avem matricea $\| c_{k'l} \|$scrisă sub o formă foarte comodă pentru înlocuirea ei în ecuația fundamentală a invarianței, (44.3). Făcînd această operație, obținem

$$\left\{\exp\left[\frac{2\pi i}{N}\,(l_1 + \dots + l_r)\right] - 1\right\} A_{l_1 \dots l_r} = 0. \tag{46.12}$$

Numai acele componente pot fi diferite de zero pentru care se anulează acolada. Însă $e^{2\pi i s} = 1$ atunci, și numai atunci, cînd s este un număr întreg sau zero. Deci vor fi diferite de zero numai acele componente ciclice ale unui tensor invariant față de grupul

N a căror sumă a indicilor este egală cu zero sau divizibilă prin N. Am obținut o regulă foarte simplă, care ne permite scrierea directă a tuturor componentelor unui tensor care sînt diferite de zero, tensorul fiind invariant față de orice grup al rotațiilor, ce-i drept numai într-un sistem de coordonate ciclic. Să enumerăm, de pildă, componentele ciclice diferite de zero ale tensorului de rangul patru, **A**, invariant față de grupul 3 (pentru simplitate vom scrie semnul minus deasupra indicelui)

$$A_{\bar{1}1\bar{1}0},\ A_{\bar{1}\bar{1}11},\ A_{\bar{1}001},\ A_{0000},\ A_{0111},$$

precum și componentele care se obțin din cele scrise, prin orice permutare posibilă a indicilor (numărul total al componentelor diferite de zero este egal cu $4 + 6 + 12 + 1 + 4 = 27$).

Să vedem cum se vor modifica aceste rezultate pentru rotațiile cu inversie. În cazul inversiei, coordonatele ciclice se comportă la fel ca și cele carteziene: toate își schimbă semnul. Din această cauză, matricea transformării coordonatelor ciclice, în cazul unei rotații cu inversie, se deosebește de matricea obținută mai înainte pentru rotația simplă, numai prin semn

$$c_{k'l} = - e^{il\varphi}\, \delta_{k'l}. \tag{46.13}$$

Condiția de invarianță a tensorului față de o axă de inversie de ordinul N va fi deci de forma

$$\left\{(-1)^r \exp\left[\frac{2\pi i}{N}(l_1 + \ldots + l_r)\right] - 1\right\} A_{l_1 \ldots l_r} = 0, \tag{46.14}$$

unde r este rangul tensorului **A**. Pentru tensorii de rang par, prin urmare, ea nu se deosebește, în general, de condiția de invarianță față de o axă simplă de același ordin. Însă în cazul tensorilor de rang impar, invarianți față de grupul $\bar{N}$ vor fi diferite de zero numai componentele pentru care cîtul dintre suma indicilor și ordinul axei este un număr semiîntreg

$$\frac{1}{N}(l_1 + \ldots + l_r) = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{5}{2}, \ldots \tag{46.15}$$

Într-adevăr, paranteza pătrată din ecuația de invarianță (46.14), pentru un r impar, se anulează în această situație, și numai în aceasta.

Generalizarea condiţiilor de invarianţă deduse pentru pseudotensori nu prezintă nici o dificultate.

Dacă un tensor are diferite de zero numai acele componente ciclice a căror sumă a indicilor este egală cu zero, atunci condiţia de invarianţă este satisfăcută pentru orice N. Aceasta înseamnă însă că tensorul dat este invariant faţă de grupul limită ∞, fiind deci clar că numai aceşti tensori au o asemenea proprietate. Acest rezultat permite nu numai găsirea formei generale a tensorilor de material pentru texturi, ci stă, totodată, la baza demonstrării uneia dintre cele mai importante teoreme din fizica teoretică a cristalelor.

T e o r e m a l u i H e r m a n n. Dacă un tensor de rangul r are o axă de simetrie de ordinul N, iar $r < N$, atunci acest tensor are şi o axă de simetrie de ordin infinit (Hermann, 1934).

Demonstraţia acestei teoreme este foarte simplă. Deoarece indicii ciclici capătă numai valorile -1, 0, 1, suma indicilor pentru orice componentă nu depăşeşte, în valoare absolută, rangul tensorului, r. Dacă $r < N$, atunci, pentru realizarea condiţiei de invarianţă, este necesar ca această sumă, pentru componentele diferite de zero, să fie egală cu zero. Dar aceasta înseamnă că tensorul are o axă de simetrie de ordin infinit.

Teorema lui Hermann are numeroase aplicaţii. Tensorii de material de rangul doi pentru cristalele din categoria medie au, conform acestei teoreme, o axă de ordin infinit; studiind proprietăţile dielectrice ale cristalelor, am întîlnit deja acest caz. Toţi tensorii de rangul doi ai cristalelor cubice sînt izotropi, cristalele cubice avînd patru axe de ordinul trei; acest fapt l-am văzut, de asemenea. Mai departe, tensorii de rangul trei pentru cristalele claselor 4, 6 şi pentru texturile din clasa ∞ coincid ca formă; de asemenea, aceşti tensori coincid pentru cristalele din clasele 422, 622 şi texturile din clasa $\infty 2$, pentru cristalele clasei $4mm$, $6mm$ şi pentru texturile clasei ∞m. Tensorii de rangul patru coincid ca formă pentru subsistemele $6/m$ şi ∞/m precum şi pentru subsistemele $6/mmm$ şi ∞/mm. Vom vedea mai tîrziu, cînd vom face cunoştinţă cu proprietăţile care se exprimă cu ajutorul tensorilor de rangul trei şi rangul patru, importanţa acestor rezultate pentru fizica cristalelor.

Aşadar, ştim să găsim componentele ciclice nenule ale tensorilor invarianţi faţă de grupurile N şi $\bar{N}$, invarianţi, totodată şi faţă de grupul limită ∞. Noi căutăm însă componentele carteziene ale tensorilor, nu pe cele ciclice. Se pune problema găsirii unui procedeu comod de transformare a componentelor ciclice în componente carteziene. Vedem că şi aici ne este de folos faptul că componentele tensorilor se transformă ca produsele coordonatelor

corespunzătoare; tocmai pe aceasta este bazat procedeul pe care îl vom demonstra prin exemple.

Să convenim asupra unor notaţii. În locul indicilor ciclici 1, 0 şi —1 vom scrie ξ, z şi, respectiv, $\bar{\xi}$. Vom nota componentele tensoriale cu acolade cu un coeficient, de exemplu, $a\{\xi\xi\xi\}$; în acest caz, conţinutul parantezelor pătrate arată ce indici are componenta dată, iar coeficientul, valoarea componentei.

Conţinutul acoladelor poate fi supus transformărilor identice conform formulei (46.3), şi anume

$$\{\xi\} = \{x - \mathrm{i}y\} = \{x\} - \mathrm{i}\{y\},$$

$$\{\bar{\xi}\} = \{x + \mathrm{i}y\} = \{y\} + \mathrm{i}\{y\}.$$

Dacă în acolade intră doi sau mai mulţi indici, trebuie efectuată înmulţirea; aceasta se face în mod obişnuit, dar cu o singură deosebire: în nici un caz nu se admite schimbarea ordinei factorilor, deoarece aceasta ar însemna permutarea indicilor. Coeficientuln poate fi însă permutat în orice loc, ba chiar se poate scoate afara parantezei. De exemplu,

$$\{\xi\xi\} = \{(x - \mathrm{i}y)\ (x - \mathrm{i}y)\} = \{xx\} - \{yy\} - \mathrm{i}\{xy\} - \mathrm{i}\{yx\}.$$

Parantezele $\{\bar{\xi}\bar{\xi}\}$ se obţin direct din parantezele precedente luînd conjugatele complexe, adică schimbînd semnul termenilor imaginari; aceasta reduce la jumătate numărul de operaţii. Mai remarcăm că, avînd calculate, să zicem, parantezele

$$\{\xi\xi\bar{\xi}\} = \{xxx\} + \{xyy\} + \{yxy\} - \{yyx\} +$$

$$+ \mathrm{i}\,(\{xxy\} - \{xyx\} - \{yxx\} - \{yyy\},$$

se pot transcrie imediat şi parantezele $\{\xi\bar{\xi}\xi\}$ şi $\{\bar{\xi}\xi\xi\}$ — pentru aceasta fiind necesar să se facă pur şi simplu permutările corespunzătoare şi în partea dreaptă a egalităţii: pentru obţinerea lui $\{\xi\bar{\xi}\xi\}$ trebuie schimbate între ele locurile indicilor al doilea şi al treilea, în toate parantezele din membrul drept, iar pentru deducerea lui $\{\bar{\xi}\xi\xi\}$ locurile primului cu cel de al treilea indice.

Vom lua acum un exemplu: să calculăm un tensor de rangul trei, invariant faţă de rotaţiile în jurul axei de ordinul trei. Îl scriem sub forma

$$\mathfrak{g} = a\{\xi\xi\xi\} + \bar{a}\{\bar{\xi}\bar{\xi}\bar{\xi}\} + b_1\{\xi\bar{\xi}z\} + \bar{b}_1\{\bar{\xi}\xi z\} + b_2\{\xi z\bar{\xi}\} +$$

$$+ \bar{b}_2\{\bar{\xi}z\xi\} + b_3\{z\xi\bar{\xi}\} + \bar{b}_3\{z\bar{\xi}\xi\} + d\{zzz\}.$$

Aici sînt transcrise toate componentele lui care nu se anulează, a, $\bar{a}$, b_1, $\bar{b}_1, \ldots$, fiind coeficienţi complecşi arbitrari. Desfăcînd parantezele obţinem

$$\mathfrak{g} = (a + \bar{a})\,(\{xxx\} - \{xyy\} - \{yxy\} - \{yyx\}) +$$

$$+\, i(a - \bar{a})\,(\{yyy\} - \{xxy\} - \{xyx\} - \{yxx\}) +$$

$$+\,(b_1 + \bar{b}_1)\,(\{xxz\} + \{yyz\}) + i\,(b_1 - \bar{b}_1)\,(\{xyz\} - \{yxz\}) +$$

$$+\,(b_2 + \bar{b}_2)\,(\{xzx\} + \{yzy\} + i\,(b_2 - \bar{b}_2)\,(\{xzy\} - \{yzx\}) +$$

$$+\,(b_3 + \bar{b}_3)\,(\{zxx\} + \{zyy\{ + i\,(b_3 - \bar{b}_3)\,(\{zxy\} - \{zyx\} + d\,\{zzz\}.$$

Evident, coeficienţii acoladelor, care conţin indicii x, y, z, sînt componentele corespunzătoare din sistemul de coordonate cartezian. Se constată că acestea sînt legate între ele. Într-adevăr, egalitatea obţinută arată că vor fi diferite de zero numai componentele

$$[xxx] = -[xyy] = -[yxy] = -[yyx] \text{ sau } g_{111} = -g_{122} = -g_{212} = -g_{221}$$

$$[yyy] = -[xxy] = -[xyx] = -[yxx] \text{ sau } g_{222} = -g_{112} = -g_{121} = -g_{211},$$

$$[xxz] = [yyz] \text{ sau } g_{113} = g_{223},$$

$$[xyz] = -[yxz] \text{ sau } g_{123} = -g_{213},$$

$$[xzx] = [yzy] \text{ sau } g_{131} = g_{232},$$

$$[xzy] = -[yzx] \text{ sau } g_{132} = -g_{231},$$

$$[zxx] = [zyy] \text{ sau } g_{311} = g_{322},$$

$$[zxy] = -[zyx] \text{ sau } g_{312} = -g_{321},$$

$$[zzz] \text{ sau } g_{333}.$$

Prin urmare, dintre cele 21 de componente diferite de zero, numai nouă sînt independente.

Să studiem tensorul $\mathbf{d}$, de asemenea invariant faţă de grupul 3, care însă, în afară de aceasta, este şi simetric în raport cu indicii

al doilea și al treilea. Componentele sale diferite de zero sînt următoarele

$$d_{111} = -d_{122} = -d_{212} = -d_{221}, \quad d_{222} = -d_{112} = -d_{121} = -d_{211},$$

$$d_{113} = d_{131} = d_{223} = d_{232}, \quad d_{123} = d_{132} = -d_{213} = -d_{231},$$

$$d_{311} = d_{322}, \quad d_{333}.$$

În total sînt 19 componente, dintre care 6 sînt independente.

În fine, tensorul **f**, simetric în raport cu toți indicii, invariant în raport cu același grup, are diferite de zero componentele

$$f_{111} = -f_{122} = -f_{212} = -f_{221}, \quad f_{222} = -f_{112} = -f_{121} = -f_{211},$$

$$f_{113} = f_{131} = f_{311} = f_{223} = f_{322} = f_{232}, \quad f_{333}.$$

Sînt 15 la număr, independente fiind doar patru.

Nici construirea tensorilor corespunzători, invarianți față de grupul 32 sau grupul $3m$ nu întîmpină vreo dificultate. Pentru aceasta este necesar să se determine componentele care se anulează ca urmare a condiției de invarianță față de 2_x sau, respectiv, m_x. Astfel, pentru grupul 32, utilizînd tabelul întocmit în paragraful precedent special pentru un tensor de rangul trei, vom găsi componentele tensorului **g**, diferite de zero

$$g_{111} = -g_{122} = -g_{212} = -g_{221},$$

$$g_{123} = -g_{213}, \quad g_{132} = -g_{231}, \quad g_{312} = -g_{321},$$

ale tensorului **d**

$$d_{111} = -d_{122} = -d_{212} = -d_{221}, \quad d_{123} = d_{132} = -d_{213} = -d_{231}$$

și, în sfîrșit, ale tensorului **f**

$$f_{111} = -f_{122} = -f_{212} = -f_{221}.$$

Un alt procedeu de construire a tensorilor invarianți față de grupurile sistemelor trigonal și hexagonal este dat în lucrările lui Fumi (1952, a) sau Fieschi și Fumi (1953).

§ 47. APLICAREA TEORIEI REPREZENTĂRILOR GRUPURILOR LA PROBLEMELE DE SIMETRIE A TENSORILOR

Numeroase probleme legate de simetria tensorilor se rezolvă cu ajutorul metodelor matematice speciale, bazate pe rezultate mai profunde din teoria grupurilor (mai exact, ale unuia dintre capitolele acesteia denumit teoria reprezentărilor grupurilor). Aceste metode se aplică pe larg în ultimul timp, în toate ramurile fizicii teoretice în care este necesar să se țină cont de simetria obiectelor analizate: în teoria spectrelor moleculare și în teoria spectrelor cristalelor, în teoria particulelor elementare, în teoria reacțiilor nucleare etc.

Vom prezenta aici, fără a face demonstrația, numai două dintre rezultate, care interesează simetria tensorilor. Primul dintre ele este procedeul de construire a unui tensor invariant față de un grup cristalografic dat, G, folosind procedeul medierii tensorului în raport cu grupul: tensorului general $\mathbf{A}$, de simetrie internă dată, trebuie să i se aplice toate operațiile de simetrie, g, care intră în grupul G, calculîndu-se apoi media aritmetică a tuturor rezultatelor obținute

$$\langle \mathbf{A} \rangle_G = \frac{1}{N(G)} \sum_{g \in G} g\, \mathbf{A}. \tag{47.1}$$

Dacă grupul G are două generatoare, este mai indicat să se medieze mai întîi tensorul în raport cu subgrupul său, H_1, determinat de una dintre generatoare, iar după aceasta, rezultatul primei medieri să fie mediat în raport cu subgrupul H_2, determinat de cealaltă generatoare. Ordinea medierilor succesive nu contează. De exemplu, un tensor, invariant față de grupul 422 (generatoarele lui sînt 4_z și 2_x) poate fi calculat atît în ordinea

$$\langle \mathbf{A} \rangle_4 = \frac{1}{4} (\mathbf{A} + 4_z \mathbf{A} + 2_z \mathbf{A} + 4_z^3 \mathbf{A}),$$

$$\langle \mathbf{A} \rangle_{422} = \frac{1}{2} (\langle \mathbf{A} \rangle_4 + 2_z \langle \mathbf{A} \rangle_4),$$

cît și în ordinea

$$\langle \mathbf{A} \rangle_2 = \frac{1}{2} (\mathbf{A} + 2_x \mathbf{A}),$$

$$\langle \mathbf{A} \rangle_{422} = \frac{1}{4} (\langle \mathbf{A} \rangle_2 + 4_z \langle \mathbf{A} \rangle_2 + 2_z \langle \mathbf{A} \rangle_2 + 4_z^3 \langle \mathbf{A} \rangle_2).$$



Un al doilea rezultat important, obţinut cu ajutorul metodelor teoriei reprezentărilor grupurilor constă în posibilitatea calculării numărului componentelor independente ale unui tensor avînd date atît simetria internă cît şi cea exterioară, fără a mai fi necesar să se calculeze pentru aceasta tensorul însuşi (Bhagavantam şi Suryanarayana, 1949 ; Jahn, 1949 ; v., de asemenea, Bhagavantam şi Vencataraytudu, 1959 ; Liubarski, 1957). Acesta este egal cu media luată în raport cu grupul cristalografic G, a valorii caracterului reprezentării tensoriale, T, corespunzătoare

$$\langle \chi_T \rangle_G = \frac{1}{N(G)} = \sum_{g \in G} \chi_T(g) \tag{47.2}$$

(această metodă se aplică şi grupurilor limită — atunci medierea se realizează cu ajutorul integrării în raport cu grupul).

În tabelul 47.1 este dat numărul componentelor independente ale tensorilor şi ale pseudotensorilor de diferite simetrii exterioare şi interne, pînă la rangul opt inclusiv. Tabelul 47.1, a cuprinde tensorii şi pseudotensorii de tip par, iar tabelul 47.1,b tensorii şi pseudotensorii de tip impar. În primul dintre ele, toate cele 39 de grupuri cristalografice şi grupuri limită sînt reunite în subsisteme, deoarece forma generală a unui tensor de tip par, invariant faţă de un grup cristalografic sau limită, este aceeaşi pentru toate grupurile care intră într-un subsistem. Sînt 14 astfel de subsisteme (11 cristalografice şi 3 limită). În al doilea tabel sînt date numai grupurile fără centru de simetrie, deoarece mărimile tensoriale de tip impar, invariante faţă de grupurile cu centru de simetrie, sînt identic egale cu zero. Sînt în total 25 de grupuri fără centru de simetrie (21 cristalografice şi 4 limită).

În tabele este menţionat nu numai numărul de componente independente, ci şi numărul de invarianţi independenţi, atunci cînd acesta din urmă se deosebeşte de numărul de componente independente. În aceste cazuri, unui subsistem din tabelul 47.1, a sau unui grup din tabelul 47.1, b îi corespund două rînduri de numere : cel de sus cuprinde şirul numerelor de componente independente, iar cel de jos şirul numerelor de invarianţi independenţi.

Diferenţa dintre numărul de componente independente şi numărul de invarianţi independenţi este egală cu numărul de parametri necesari pentru a defini orientarea tensorului respectiv faţă de sistemul de coordonate. Astfel, în cazul unui vector, singurul invariant al acestuia este lungimea sa. În cristalele care au axă de simetrie vectorul de material trebuie să coincidă ca direcţia cu axa. Această condiţie defineşte complet orientarea vectorului faţă de sistemul de coordonate. Din această cauză, numărul componentelor independente ale vectorului este egal, pentru aceste

Numărul de componente independente și de invarianți independenți ai tensorilor de tip par

	$D_0 \sim \varepsilon\{V^3\}$	$\varepsilon V \sim \varepsilon D_1 \sim \{V^2\}$	D_2	$[V^2]$	V^2	εD_3	$\varepsilon[V^3]$	$\varepsilon V[V^2] \sim \{V^2\}[V^2]$	εV^3	D_4	$[V^4]$	$V[V^3]$	$[[V^2]^2]$
$\infty\infty m$, $\infty\infty$	1	0	0	1	1	0	0	0	1	0	1	1	2
$m3m$, 432, $\bar{4}3m$	1	0	0	1	1	0	0	0	1	1	2	2	3
$m3$, 23	1	0	0	1	1	1	1	1	2	1	2	3	3
∞/mm, ∞m, $\infty 2$	1	0	1	2	2	0	0	1	3	1	3	4	5
∞/m, ∞	1	1	1	2	3	1	2	4	7	1	3	6	5
$6/mmm$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$	1	0	1	2	2	0	0	1	3	1	3	4	5
$6/m$, 6, $\bar{6}$	1	1	1	2	3	1	2	4	7	1	3	6	5
$4/mmm$, 422, $4mm$, $\bar{4}2m$	1	0	1	2	2	0	0	1	3	2	4	5	6
$4/m$, 4, $\bar{4}$	1	1	1	2	3	1	2	4	7	3 2	5 4	8 7	7 6
$\bar{3}m$, 32, $3m$	1	0	1	2	2	1	1	2	4	2	4	6	6
$\bar{3}$, 3	1	1	1	2	3	3 2	3 3	6 5	9 8	3 2	5 4	10 9	7 6
mmm, 222, $mm2$	1	0	2	3	3	1	1	3	6	3	6	9	9
$2/m$, 2, m	1	1	3 2	4 3	5 4	3 2	4 3	8 7	13 12	5 4	9 8	16 15	13 12
$\bar{1}$, 1	1	3 1	5 2	6 3	9 6	7 4	10 7	18 15	27 24	9 6	15 12	30 27	21 18

	$[V^2]^2$	$[(V^2)^2]$	$V^2[V^2]$	V^4	εD_5	$\varepsilon[V^5]$	$\varepsilon V[V^4]$	$\varepsilon[V^2][V^3]$	$\varepsilon V[V[V^2]^2]$	$\varepsilon V^2[V^3]$	$\varepsilon V[V^2]^2$	$\varepsilon V^3[V^2]$
$\infty\infty m$, $\infty\infty$	2	3	2	3	0	0	0	0	0	1	1	3
$m3m$, 432, $\bar{4}3m$	3	4	3	4	0	0	1	1	1	3	3	6
$m3$, 23	4	5	5	7	0	1	3	4	4	7	8	13
∞/mm, ∞m, $\infty 2$	6	8	7	10	0	0	2	3	3	7	8	15
$\infty m/$, ∞	8	11	12	19	1	3	7	10	11	16	20	32
$6/mmm$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$	6	8	7	10	0	0	2	3	3	7	8	15
$6/m$, 6, $\bar{6}$	8	11	12	19	1	3	7	10	11	16	20	32
$4/mmm$, 422, $4mm$, $\bar{4}2m$	7	9	8	11	1	1	4	5	5	10	11	19
$4m$, 4, $\bar{4}$	10	13	14	21	3	5	11	14	15	22	26	40
	9	12	13	20	2	4	10	13	14	21	25	39
$\bar{3}m$, 32, $3m$	8	10	10	14	1	2	6	8	8	14	16	26
$\bar{3}$, 3	12	15	18	27	3	7	15	20	21	30	36	54
	11	14	17	26	2	6	14	19	20	29	35	53
mmm, 222, $mm2$	12	15	15	21	2	3	9	12	12	21	24	39
$2/m$, 2, m	20	25	28	41	5	9	21	28	29	44	52	80
	19	24	27	40	4	8	20	27	28	43	51	79
$\bar{1}$, 1	36	45	54	81	11	21	45	60	63	90	108	162
	33	42	51	78	8	18	42	57	60	87	105	159

	D_6	$[V^6]$	$V[V^5]$	$[[V^2]^3]$	$[V^2][V^4]$	$[V^2][[V^2]^2]$	$[V^2]^3$	εD_7	$\varepsilon[V^7]$	$\varepsilon V[V^6]$	D_8	$[V^8]$	$V[V^7]$	$[V^2][V^6]$
$\infty\infty m$, $\infty\infty$	0	1	1	3	2	4	5	0	0	0	0	1	1	2
$m3m$, 432, $\bar{4}3m$	1	3	4	6	6	9	12	0	0	2	1	4	6	10
$m3$, 23	2	4	6	8	9	13	20	1	2	6	1	5	10	16
∞/mm, ∞m, $\infty 2$	1	4	6	9	10	16	23	0	0	3	1	5	8	14
∞/m, ∞	1	4	9	10	14	22	38	1	4	10	1	5	12	20
$6/mmm$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$	2	5	7	10	11	17	24	1	1	5	2	7	12	19
	3	6	11	12	16	24	40	3	6	14	3	9	20	30
$6/m$, 6, $\bar{6}$	2	5	10	11	15	23	39	2	5	13	2	8	19	29
$4/mmm$, 422, $4mm$, $\bar{4}2m$	2	6	10	12	15	22	32	1	2	8	3	9	16	26
	3	8	17	16	24	34	56	3	8	20	5	13	28	44
$4/m$, 4, $\bar{4}$	2	7	16	15	23	33	55	2	7	19	4	12	27	43
$\bar{3}m$, 32, $3m$	3	7	12	14	18	26	40	2	4	12	3	10	20	32
	5	10	21	20	30	42	72	5	12	28	5	15	36	56
$\bar{3}$, 3	4	9	20	19	29	41	71	4	11	27	4	14	35	55
mmm, 222, $mm2$	4	10	18	20	27	39	60	3	6	18	5	15	30	48
	7	16	33	32	48	68	112	7	16	40	9	25	56	88
$2/m$, 2, m	6	15	32	31	47	67	111	6	15	39	8	24	55	87
	13	28	63	56	90	126	216	15	36	84	17	45	108	168
$\bar{1}$, 1	10	25	60	53	87	123	213	12	33	81	14	42	105	165

Tabelul 47.1, b

Numărul de componente independente şi de invarianţi independenţi ai tensorior de tip impar

	$\varepsilon=\varepsilon D_0=\{V^3\}$	$D_1=V=\varepsilon\{V^2\}$	εD_2	$\varepsilon[V^2]$	$\varepsilon V^2=V\{V^2\}$	D_3	$[V^3]$	$V[V^2]$	V^3	εD_4	$\varepsilon[V^4]$	$\varepsilon V[V^3]=\{V^2\}[V^3]$	$\varepsilon[[V^2]^2]$	$\varepsilon[V^2]^2$	D_5	$[V^5]$	$V[V^4]$	$V[[V^2]^2]$	$[V^2][V^3]$	$V^2[V^3]$	$V[V^2]^2$	$V^3[V^2]$	D_7	$[V^7]$	$V[V^6]$
∞∞	1	0	0	1	1	0	0	0	1	0	1	1	2	2	0	0	0	0	0	1	1	3	0	0	0
432	1	0	0	1	1	0	0	0	1	1	2	2	3	3	0	0	1	1	1	3	3	6	0	0	2
$\bar{4}3m$	0	0	0	0	0	1	1	1	1	0	0	1	0	1	0	1	2	3	3	4	5	7	1	2	4
23	1	0	0	1	1	1	1	1	2	1	2	3	3	4	0	1	3	4	4	7	8	13	1	2	6
∞2	1	0	1	2	2	0	0	1	3	1	3	4	5	6	0	0	2	3	3	7	8	15	0	0	3
∞*m*	0	1	0	0	1	1	2	3	4	0	0	2	0	2	1	3	5	8	7	9	12	17	1	4	7
∞	1	1	1	2	3	1	2	4	7	1	3	6	5	8	1	3	7	11	10	16	20	32	1	4	10
622	1	0	1	2	2	0	0	1	3	1	3	4	5	6	0	0	2	3	3	7	8	15	1	1	5
6*mm*	0	1	0	0	1	1	2	3	4	0	0	2	0	2	1	3	5	8	7	9	12	17	2	5	9
$\bar{6}m2$	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	2	1	2	1	2	4	5	5	7	8	11	1	3	7
6	1	1	1	2	3	1	2	4	7	1	3	6	5	8	1	3	7	11	10	16	20	32	3 2	6 5	14 13
$\bar{6}$	0	0	0	0	0	2 1	2 1	2 1	2 1	2 1	2 1	4 3	2 1	4 3	2 1	4 3	8 7	10 9	10 9	14 13	16 15	22 21	2 1	6 5	14 13

422	1	0	1	2	2	0	0	1	3	2	4	5	6	7	1	1	4	5	5	10	11	19	1	2	8
4mm	0	1	0	0	1	1	2	3	4	1	1	3	1	3	2	4	7	10	9	12	15	21	2	6	12
$\bar{4}2m$	0	0	1	1	1	1	1	2	3	1	2	4	3	5	1	2	5	7	7	11	13	20	2	4	10
4	1	1	1	2	3	1	2	4	7	3	5	8	7	10	3	5	11	15	14	22	26	40	3	8	20
										2	4	7	6	9	2	4	10	14	13	21	25	39	2	7	19
$\bar{4}$	0	0	2	2	2	2	2	4	6	2	4	8	6	10	2	4	10	14	14	22	26	40	4	8	20
			1	1	1	1	1	3	5	1	3	7	5	9	1	3	9	13	13	21	25	39	3	7	19
32	1	0	1	2	2	1	1	2	4	2	4	6	6	8	1	2	6	8	8	14	16	26	2	4	12
3m	0	1	0	0	1	2	3	4	5	1	1	4	1	4	2	5	9	13	12	16	20	28	3	8	16
3	1	1	1	2	3	3	4	6	9	3	5	10	7	12	3	7	15	21	20	30	36	54	5	12	28
						2	3	5	8	2	4	9	6	11	2	6	14	20	19	29	35	53	4	11	27
222	1	0	2	3	3	1	1	3	6	3	6	9	9	12	2	3	9	12	12	21	24	39	3	6	18
mm2	0	1	1	1	2	2	3	5	7	2	3	7	4	8	3	6	12	17	16	23	28	41	4	10	22
2	1	1	3	4	5	3	4	8	13	5	9	16	13	20	5	9	21	29	28	44	52	80	7	16	40
			2	3	4	2	3	7	12	4	8	15	12	19	4	8	20	28	27	43	51	79	6	15	39
m	0	2	2	2	4	4	6	10	14	4	6	14	8	16	6	12	24	34	32	46	56	82	8	20	44
		1	1	1	3	3	5	9	13	3	5	13	7	15	5	11	23	33	31	45	55	81	7	19	43
1	1	3	5	6	9	7	10	18	27	9	15	30	21	36	11	21	45	63	60	90	108	162	15	36	84
		1	2	3	6	4	7	15	24	6	12	27	18	33	8	18	42	60	57	87	105	159	12	33	81

clase, cu numărul invarianților săi independenți, adică cu unitatea. În cristalele din clasa m, vectorul de material se află în planul de simetrie fiind necesar un parametru care să definească direcția vectorului; de aceea, numărul de componente independente crește la două. În sfîrșit, în clasa 1, direcția unui vector nu este limitată în nici un fel, deci pentru definirea sa sînt necesari doi parametri; numărul de componente independente crește, în mod corespunzător, la trei.

Un alt exemplu este tensorul simetric de rangul doi, $[V^2]$. Invarianții săi independenți pot fi considerați valorile proprii, de pildă — ele definesc complet forma și dimensiunile suprafeței unui tensor. În cristalele din categoria superioară suprafața este o sferă; ea se caracterizează printr-un singur invariant; evident, nu este necesar să i se definească orientarea. În cristalele din categoria medie suprafața reprezintă o suprafață de rotație și este dată prin doi invarianți. Pentru orientarea ei ar fi suficient să se indice direcția axei de rotație, deoarece ea coincide cu axa principală de simetrie a cristalului; rezultă că și în acest caz numărul de componente independente este egal cu numărul de invarianți independenți, adică cu doi. În cristalele din categoria inferioară suprafața se definește prin trei invarianți independenți. Pentru a-i defini direcția, este suficient să se determine poziția axelor sale de simetrie. În cristalele din sistemul rombic acestea coincid cu axele de simetrie ale cristalului, astfel încît, pentru orientarea suprafeței nu mai sînt necesari alți parametri suplimentari. În cristalele din sistemul monoclinic pentru acestea este necesar un singur parametru suplimentar, care definește rotația suprafeței în jurul axei de ordinul doi sau a normalei la planul de simetrie al cristalului, astfel încît numărul de componente independente crește pînă la patru. În cristalele din sistemul triclinic, pentru orientarea suprafeței față de sistemul de coordonate, sînt necesari trei parametri suplimentari, numărul de componente independente fiind egal cu șase.

Din tabelele 47.1,a și 47.1, b se pot trage anumite concluzii relativ la forma tensorilor invarianți, față de grupurile date, cît și referitor la simetria tensorilor sau a funcțiilor tensoriale.

Dacă numărul de componente independente, în cazul a doi tensori cu simetrie internă diferită, invarianți față de același grup cristalografic sau grup limită, este aceeași, iar unul dintre grupurile de simetrie internă este un subgrup al celuilalt, atunci forma generală a acestor tensori va fi aceeași. Astfel, de exemplu, tensorii V^2 și $[V^2]$ sînt invarianți față de grupul mmm. Dacă un tensor de rangul doi este invariant față de acest grup, el va fi în mod obligatoriu simetric în raport cu indicii. Tabelul E.6 tocmai confirmă această concluzie.

Dacă numărul de componente independente ale unor tensori cu simetrie internă dată și invarianți față de două grupuri, este același, unul dintre cele două grupuri fiind un subgrup al celuilalt, atunci forma generală a acestor tensori va fi aceeași. În acest caz simetria tensorilor și simetria funcțiilor-tensori sînt evident aceleași.

Dacă numărul invarianților independenți pentru tensorii de material ai două grupuri este același, unul dintre grupuri fiind un subgrup al celuilalt, atunci grupurile de simetrie exterioară ale acestor tensori coincid. Dacă în același timp numărul de componente independente este diferit, atunci grupurile de simetrie exterioară ale funcțiilor-tensori sînt tot diferite. Numărul de invarianți independenți este legat, astfel, de simetria tensorului, iar numărul de componente independente de simetria funcțiilor-tensori. Deci, coincidența dintre numărul de invarianți independenți ai tensorului $[V^2]$, pentru sistemele rombic, monoclinic și triclinic, arată că simetria exterioară a tensorului $[V^2]$ este aceeași pentru aceste sisteme, fiind egală cu mmm. Pe de altă parte, simetria exterioară a funcției-tensor $[V^2]$ este, pentru aceste trei sisteme, din contra diferită, fiind egală respectiv cu mmm, $2/m$ și 1. Coincidența numărului de invarianți independenți ai tensorului $[[V^2]^2]$ pentru subsistemele superior și inferior ai sistemului tetragonal arată că simetria exterioară a acestui tensor este egală cu $4/mmm$, pentru ambele subsisteme. Simetria funcției-tensor $[[V^2]^2]$ este diferită pentru subsistemele inferior și superior, întrucît numărul lor de componente independente este același.

Se pot prezenta și alte exemple în care calculul numărului de componente independente și al numărului de invarianți independenți arată că grupurile de simetrie exterioară ale tensorului și ale funcției-tensor corespunzătoare nu coincid. Unele cazuri de necoincidență a grupurilor de simetrie ale tensorului și ale funcției-tensor sînt date în tabelul 47.2.

Cu simbolurile D_r, în tabelele 47.1,a și 47.1,b sînt notați *tensorii ireductibili* de rang r — aceștia sînt tensori simetrici în raport cu toți indicii, toate urmele lor fiind egale cu zero. Astfel, D_2 este simbolul tensorului simetric de rangul doi, **T**, a cărui urmă, $T_{ii} = 0$; D_3 este simbolul tensorului de rangul trei, simetric în raport cu toți indicii, care satisface condiția $T_{iij} = T_{jii} = T_{jji} = 0$. Tensorii ireductibili se numesc astfel, pentru că se transformă după reprezentările ireductibile ale grupului rotațiilor (după aceleași reprezentări se transformă și funcțiile sferice; asupra legăturii dintre ele și tensorii ireductibili, vezi Șcerbakov, 1972). Tensorii ireductibili ai primelor patru ranguri au denumiri speciale: *vector*, *deviator*, *septor*, *nonor* (Shouten, 1965).

În tabelul 47.3 sînt grupați toți tensorii ireductibili enumerați, de tip impar, care se deosebesc prin simetria exterioară.

Tabelul 47.2

Cazurile în care simetria funcției-tensor este mai mică decît simetria tensorului

S	*G*	*m*	G^{ω}	*n*	*S*	*G*	*m*	G^{ω}	*n*
V	∞m	1	1	3	V^3	$\bar{6}m2$	1	$\bar{6}$	2
			m	2		$\bar{3}m$	4	$\bar{3}$	5
εV	∞/m	1	$\bar{1}$	3	$[V^4]$	$4/mmm$	4	$4/m$	5
$[V^2]$	*mmm*	3	$\bar{1}$	6	$\varepsilon\,[V^4]$	32	4	3	5
			$2/m$	4		422	4	4	5
$\varepsilon\,[V^2]$	222	3	1	6		$\bar{6}m2$	1	$\bar{6}$	2
			2	4	$[[V^2]^2]$	$\bar{3}m$	6	$\bar{3}$	7
	$\bar{4}2m$	1	*n*	2		$4/mmm$	6	$4/m$	7
			$\bar{4}$	2		32	6	3	7
$[V^3]$	*mm*2	3	2	4	$\varepsilon[[V^2]^2]$	422	6	4	7
	3*m*	3	3	4		$\bar{6}m2$	1	$\bar{6}$	2
	$\bar{4}3m$	1	$\bar{4}$	2	$[V^5]$	4*mm*	4	4	5
	$\bar{6}m2$	1	$\bar{6}$	2	$[V^6]$	$6/mmm$	5	$6/m$	6
$V\,[V^2]$	$\bar{6}m2$	1	$\bar{6}$	2	$[V^7]$	6*mm*	5	6	6

Notații. *G* și G^{ω} — grupuri de simetrie exterioară ale funcției-tensor, *S* — grupul de simetrie internă a lor, *m* și *n* — numărul de invarianți independenți și, respectiv, de componente independente.

Tabelul 47.3

Tensorii ireductibili de diverse simetrii

Deviatori și pseudodeviatori

D $\tilde{\mathbf{D}}$

mmm — 222

	1	2	3	
	$-a$	0	0	1
		$-b$	0	2
			$a+b$	3

$2 \parallel X_1, X_2, X_3$

mmm — $\bar{4}2m$

$-a$	0	0
	a	0
		0

$4/mmm$ — $\bar{4} \parallel X_3,\ 2 \parallel X_1$

∞/mm — $\infty 2$

$-a$	0	0
	$-a$	0
		$2a$

$\infty \parallel X_3$

Septori și pseudoseptori

S $\tilde{\mathbf{S}}$

1 — $\bar{1}$

	11	22	33	23
1	$a+b$	$-a$	$-b$	g
2	$-c$	$c+d$	$-d$	
3	$-e$	$-f$	$e+f$	

m — $\bar{1}$

$a+b$	$-a$	$-b$	0
0	0	0	
$-e$	$-f$	$e+f$	

$m \parallel X_2$ — $2'/m$

$mm2$ — $2/m$

0	0	0	0
0	0	0	
$-e$	$-f$	$e+f$	

$2 \parallel X_3,\ m \perp X_1$ — $2/mm'm'$

$3m$ — $\bar{3}$

0	0	0	0
$-c$	c	0	
$-e$	$-e$	$2e$	

$3 \parallel X_3,\ m \perp X_1$ — $\bar{3}m'$

$\bar{6}m2$ — $\bar{3}m$

0	0	0	0
$-c$	c	0	
0	0	0	

$\bar{6} \parallel X_3,\ m \perp X_1$ — $\bar{6}/mmm$

∞m — ∞/m

0	0	0	0
0	0	0	
$-e$	$-e$	$2e$	

$\infty \parallel X_3$ — ∞/mm'

$\bar{4}3m$ — $m3$

0	0	0	g
0	0	0	
0	0	0	

$4 \parallel X_1, X_2, X_3$ — $m3m'$

Nonori și pseudononori

N $\tilde{\mathbf{N}}$

$\bar{1}$ — $\bar{1}$

11	22	33	23	13	12	
$b+c$	$-c$	$-b$	$d+e$	$-g$	$-h$	11
	$c+a$	$-a$	$-d$	$f+g$	$-k$	22
		$a+b$	$-e$	$-f$	$h+k$	33

$2/m$ — 2

$b+c$	$-c$	$-b$	0	$-g$	0
	$c+a$	$-a$	0	$f+g$	0
		$a+b$	0	$-f$	0

$2 \parallel X_2$

$\bar{1}$, $2'/m'$ — m

0	0	0	$d+e$	0	$-h$
	0	0	$-d$	0	$-k$
		0	$-e$	0	$h+k$

$m \perp X_2$

	$b+c \quad -c \quad -b \quad 0 \quad 0 \quad 0$	222
mmm	$c+a \quad -a \quad 0 \quad 0 \quad 0$	
	$a+b \quad 0 \quad 0 \quad 0$	$2 \parallel X_1, X_2, X_3$
$2/m$	$0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad -h$	2
	$0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad -k$	
$2/mm'm'$	$0 \quad 0 \quad 0 \quad h+k$	$2 \parallel X_3,\ m \perp X_1$
	$-3c \quad -c \quad 4c \quad d \quad 0 \quad 0$	32
$\bar{3}m$	$-3c \quad 4c \quad -d \quad 0 \quad 0$	
	$-8c \quad 0 \quad 0 \quad 0$	$3 \parallel X_3,\ 2 \parallel X_1$
	$a+c \quad -c \quad -a \quad 0 \quad 0 \quad 0$	422
$4/mmm$	$a+c \quad -a \quad 0 \quad 0 \quad 0$	
	$2a \quad 0 \quad 0 \quad 0$	$4 \parallel X_3,\ 2 \parallel X_1$

$4/mmm$	$0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad -h$	$4mm$
	$0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad h$	
$8'/mm'm$	$0 \quad 0 \quad 0 \quad 0$	$4 \parallel X_3,\ m \perp X$
mmm	$-a \quad 0 \quad a \quad 0 \quad 0 \quad 0$	$\bar{4}2m$
	$a \quad -a \quad 0 \quad 0 \quad 0$	
$4'/mmm'$	$0 \quad 0 \quad 0 \quad 0$	$\bar{4} \parallel X_3,\ 2 \parallel X_1$
$\bar{3}m$	$0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad -g \quad 0$	$\bar{6}m2$
	$0 \quad 0 \quad 0 \quad g \quad 0$	
$6'm'm'm$	$0 \quad 0 \quad 0 \quad 0$	$\bar{6} \parallel X_3,\ m \parallel X_1$
	$-3c \quad -c \quad 4c \quad 0 \quad 0 \quad 0$	$\infty 2$
∞/mm	$-3c \quad 4c \quad 0 \quad 0 \quad 0$	
	$-8c \quad 0 \quad 0 \quad 0$	$\infty \parallel X_3$
	$2a \quad -a \quad -a \quad 0 \quad 0 \quad 0$	432
$m3m$	$2a \quad -a \quad 0 \quad 0 \quad 0$	
	$2a \quad 0 \quad 0 \quad 0$	$4 \parallel X_1, X_2, X_3$

Tensorii de tip par ai fiecărui subsistem au aceeași formă ca și tensorii de tip impar pentru clasa enantiomorfă a aceluiași subsistem, ceea ce și este utilizat în tabel. Tensorilor de tip impar pentru clasele neenantiomorfe le corespund tensori de tip par, care se deosebesc de alți tensori ai aceluiași subsistem prin grupul de antisimetrie — și acesta din urmă este dat în tabelul 47.3 (asupra antisimetriei tensorilor, vezi §§ 67, 68). În tabelele 47.3 și 47.4 vectorii sînt notați cu **V**, deviatorii cu **D**, septorii cu **S** și nonorii cu **N**; tilda deasupra literei înseamnă „pseudo".

Mulți dintre tensorii enumerați în tabelul 47.3 au numai un singur invariant independent; astfel sînt, de pildă, deviatorii de simetrie ∞/mm, pseudodeviatorii $\infty 2$ și $\bar{4}2m$, septorii $\bar{4}3m$, ∞m, $\bar{6}m2$. Suprafața fiecăruia dintre acești tensori are o formă perfect

determinată, putînd fi diferită numai dimensiunea ei, în funcţie de mărimea invariantului. Dacă o astfel de suprafaţă nu iese din

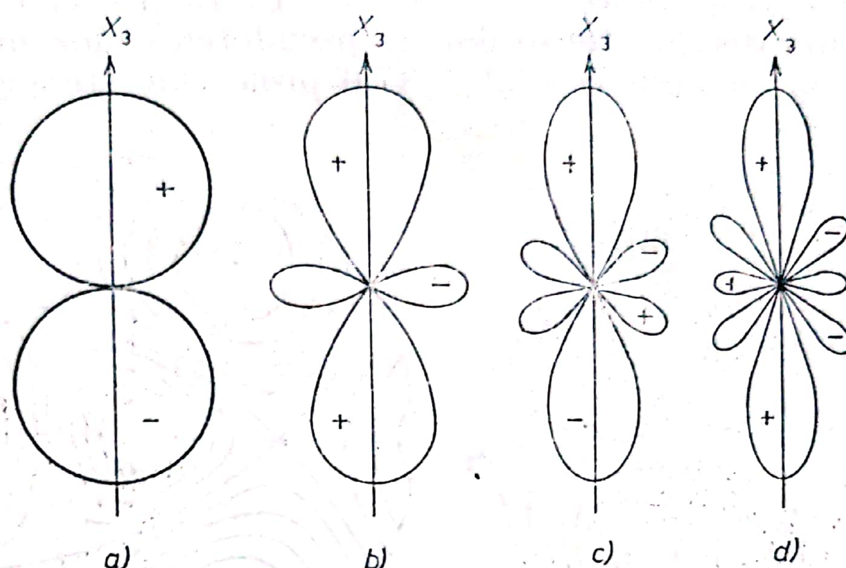


Fig. 47.1. Secţiuni ale suprafeţelor tensorilor unitari : *a*) a unui vector, $\mathbf{V}^0[\infty m]$ şi a unui pseudovector $\tilde{\mathbf{V}}^0[\infty/m)$; a unui deviator, $\mathbf{D}^0[\infty/mm]$, şi a unui pseudodeviator, $\tilde{\mathbf{D}}^0[\infty 2]$; *c*) a unui septor, $\mathbf{S}^0[\infty m]$, şi a unui pseudoseptor, $\tilde{\mathbf{S}}^0[\infty/m]$; *d*) a unui nonor, $\mathbf{N}^0[\infty/\mathrm{mm}]$, şi a unui pseudononor, $\tilde{\mathbf{N}}^0[\infty 2]$; pentru pseudotensori, părţile pozitive şi cele negative sînt înlocuite prin părţi dextrogire şi părţi levogire (Butabaev şi Sirotin, 1972).

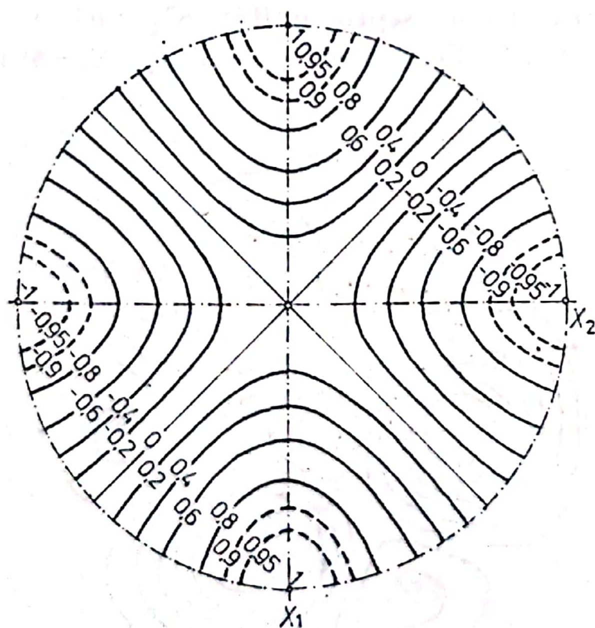


Fig. 47.2. Proiecţia stereografică a suprafeţei unui pseudodeviator $\tilde{\mathbf{D}}^0[\bar{4}2m]$; cifrele pozitive corespund regiunilor dextrogire, iar cele negative, regiunilor levogire. Aceeaşi formă are proiecţia stereografică a suprafeţei unui deviator unitar de simetrie *mmm* şi antisimetrie $4'/m'mm'$ (v. § 68).

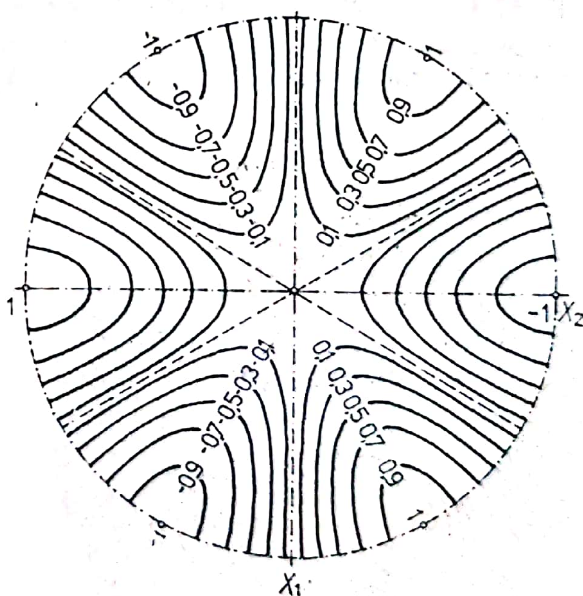


Fig. 47.3. Proiecţia stereografică a suprafeţei unui septor unitar, $\mathbf{S}^0[\bar{6}m2]$, şi a unui pseudoseptor, $\hat{\mathbf{S}}^0[3m]$.

limitele sferei de rază unitate, fiind tangentă în regiunea sa pozitivă (respectiv dreaptă) la aceasta, vom numi suprafaţa precum şi tensorul pe care îl reprezintă, *unitari*. În figura 47.1 sînt date secţiunile suprafeţelor tensorilor şi pseudotensorilor unitari care au axa ∞, iar în figurile 47.2 — 47.6 proiecţiile stereografice ale

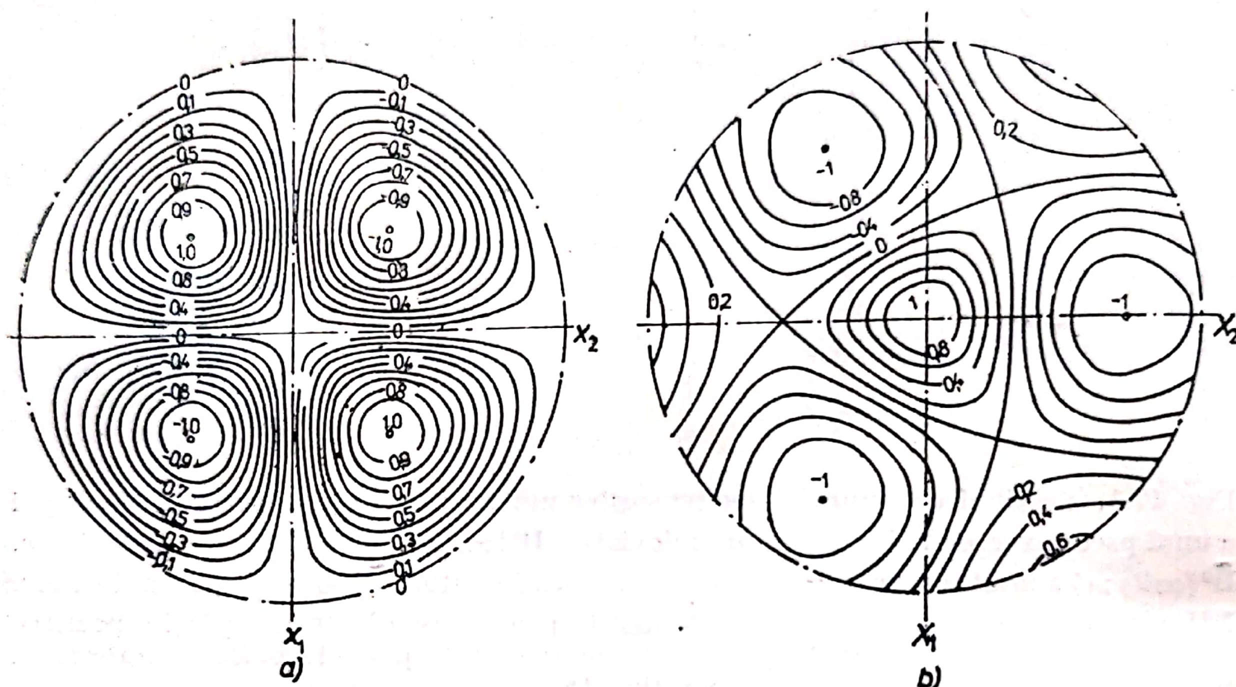


Fig. 47.4. Proiecţiile stereografice ale suprafeţei unui septor unitar, $S^0[\bar{4}3m]$, şi a unui pseudoseptor, $\tilde{S}^0[m3]$; *a*) în structură standard („cubică") $\bar{4} \parallel X_1X_2, X_3$; *b*) în structură „romboedrică" $3 \parallel X_3$, $m \perp X_1$.

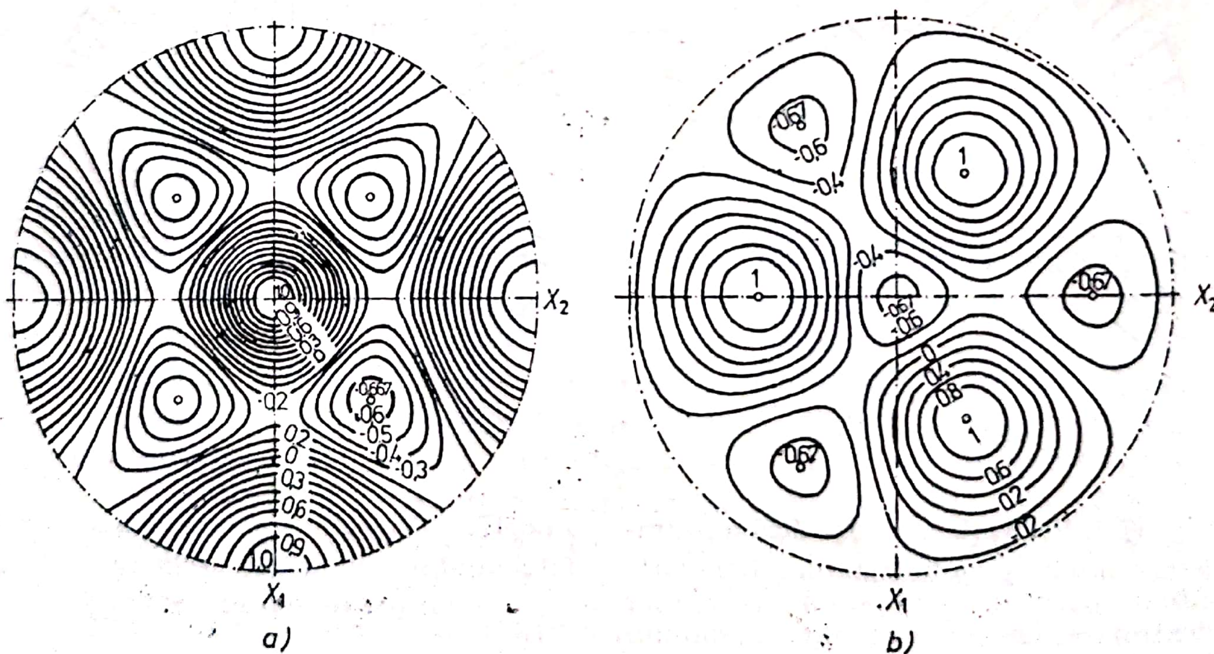


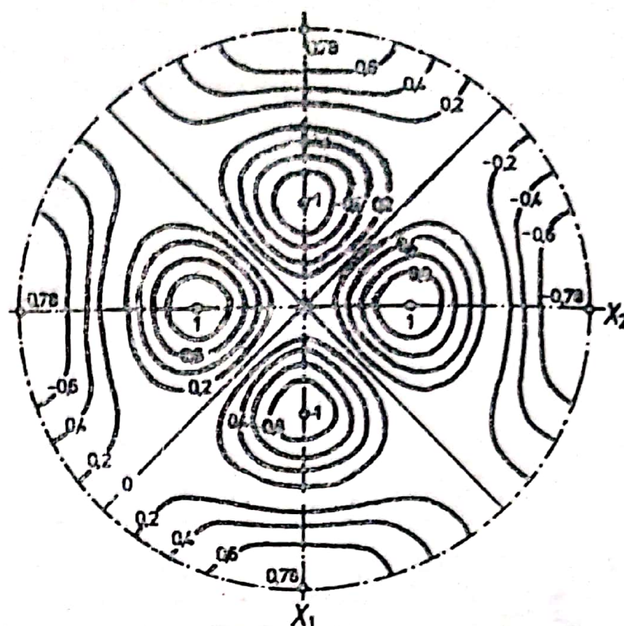
Fig. 47.5. Proiecţiile stereografice ale suprafeţei unui nonor unitar, $N^0[m3m]$, şi a unui pseudononor, $\tilde{N}^0[432]$: *a*) în structură standard („cubică") $4 \parallel X_1X_2, X_3$; *b*) în structură, „romboedrică", $3 \parallel X_3$, $2 \parallel X_1$.

Tabelul 47.4

Tensorii unitari, ireductibili și suprafețele lor

Tensorii și orientările lor	Componentele nenule	Ecuația suprafeței
$\mathbf{V}^0[\infty m]$, $\tilde{\mathbf{V}}^0[\infty/m]$, $\infty \parallel X_3$	$V^0_3 = 1$	$r = \cos \vartheta$
$\mathbf{D}^0[\infty/mm]$, $\tilde{\mathbf{D}}^0[\infty 2]$, $\infty \parallel X_3$	$D^0_{11} = D^0_{22} - 1/2$, $D^0_{33} = 1$	$r = (1/4)\ (1 + 3 \cos 2\vartheta)$
$\tilde{\mathbf{D}}^0[\bar{4}2m]$, $\bar{4} \parallel X_3$, $2 \parallel X_1$	$D^0_{11} = 1$, $D^0_{22} = -1$	$r = (1/2)\ (1 - \cos 2\vartheta) \cos 2\varphi$
$\mathbf{S}^0[\infty m]$, $\tilde{\mathbf{S}}^0[\infty/m]$, $\infty \parallel X_3$	$S^0_{333} = 1$, $S^0_{113} = S^0_{223} = -1/2$	$r = (1/8)\ (3 \cos \vartheta + 5 \cos 3\vartheta)$
$\mathbf{S}^0[\bar{4}3m]$, $\tilde{\mathbf{S}}^0[m3]$, $2 \parallel X_1, X_2, X_3$	$S^0_{123} = \sqrt{3/2}$	$r = (3\sqrt{3}/8)\ (\cos \vartheta - \cos 3\vartheta) \sin 2\varphi$
$\mathbf{S}^0[\bar{4}3m]$, $\tilde{\mathbf{S}}^0[m3]$, $3 \parallel X_3$, $2 \parallel X_1$	$S^0_{333} = 1$, $S^0_{113} = S^0_{223} = -1/2$, $S^0_{112} = 1/\sqrt{2}$, $S^0_{222} = -1/\sqrt{2}$	$r = (1/8)\ [3 \cos \vartheta + 5 \cos 3\vartheta +$ $+ \sqrt{2}\ (3 \sin \vartheta - \sin 3\vartheta) \sin 3\varphi]$
$\mathbf{S}^0[\bar{6}m2]$, $\tilde{\mathbf{S}}^0[\bar{3}m]$, $3 \parallel X_3$, $m \perp X_1$	$S^0_{112} = 1$, $S^0_{222} = -1$	$r = (1/4)\ (3 \sin \vartheta - \sin 3\vartheta) \sin 3\varphi$
$\mathbf{N}^0[\infty/mm]$, $\tilde{\mathbf{N}}^0[\infty 2]$, $\infty \parallel X_3$	$N^0_{1111} = N^0_{2222} = 3/8$, $N^0_{3333} = 1$, $N^0_{1122} = 1/8$, $N^0_{1133} = N^0_{2233} = -1/2$	$r = (1/64)\ (9 + 20 \cos 2\vartheta + 35 \cos 4\vartheta)$
$\mathbf{N}^0[m3m]$, $\tilde{\mathbf{N}}^0[432]$, $4 \parallel X_1, X_2, X_3$	$N^0_{1111} = N^0_{2222} = N^0_{3333} = 1$, $N^0_{2233} = N^0_{3311} = N^0_{1122} = -1/2$	$r = (1/64)\ (9 + 20 \cos 2\vartheta + 35 \cos 4\vartheta +$ $+ 5\ (3 - 4 \cos 2\vartheta + \cos 4\vartheta) \cos 4\varphi]$
$\mathbf{N}^0[m3m]$, $\tilde{\mathbf{N}}^0[432]$, $3 \parallel X_3$, $2 \parallel X_1$	$N^0_{1111} = N^0_{2222} = -1/4$, $N^0_{3333} = -2/3$, $N^0_{1122} = -1/12$, $N^0_{1133} = N^0_{2233} = 1/2$, $N^0_{1123} = 5\sqrt{2}/6$, $N^0_{2223} = -5\sqrt{2}/6$	$r = -(1/96)\ [9 + 20 \cos 2\vartheta + 35 \cos 4\vartheta -$ $- 20\sqrt{2}(2 \sin 2\vartheta - \sin 4\vartheta) \sin 3\varphi]$
$\tilde{\mathbf{N}}^0[\bar{4}2m]$, $\bar{4} \parallel X_3$, $2 \parallel X_1$	$N^0_{1111} = N^0_{2233} = 7/9$ $N^0_{2222} = N^0_{1133} = -7/9$	$r = (7/72)\ (3 + 4 \cos 2\vartheta -$ $- 7 \cos 4\vartheta) \cos 2\varphi$

Fig. 47.6. Proiecția stereografică a suprafeței unui pseudonor unitar, $N^0[\bar{4}2m]$; cifrele pozitive corespund părților dextrogire, iar cele negative, părților levogire.



suprafețelor altor cîtorva tensori și pseudotensori unitari. Componentele diferite de zero ale acestor tensori și ecuațiile suprafețelor lor sînt cuprinse în tabelul 47.4. Menționăm că ecuațiile suprafețelor tensorilor ireductibili unitari, D_l, care au axă ∞, se exprimă prin polinoamele Legendre, P_l, de ordinul l (v. Ianke, Emde, Lösch, 1968): $r = P_l(\cos \theta)$. Pe suprafețe apar clar simetria și antisimetria tensorilor ireductibili unitari, extremurile componentelor lor normale precum și planurile izotrope. În proiecțiile stereografice ele apar ca linii de nivel, care coincid cu cercurile mari (în particular, cu cercul proiecției, cînd axa de izotropie iese din centrul proiecției, sau cu diametrul cînd axa de izotropie iese pe cercul proiecției). Astfel, figura 47.5 demonstrează că pentru $N°[m3m]$ sînt izotrope planurile $\{111\}$ (în figura 47.5, b una dintre ele este dusă pe cercul proiecției); pe aceste planuri, $r = -0{,}25$.

Pentru alte aplicații ale teoriei reprezentărilor grupurilor în fizica cristalelor, în special în teoria tranzițiilor de fază și în teoria vibrațiilor cristalului (și a spectrelor de absorbție și de difuzie combinată, determinate de ele) vezi Liubarski (1957); Bhagavantam și Vencatarayudu (1959); Wigner (1961); Heine (1963); Landau și Lifșiț (1963, capitolele XII, XIII și 1964, capitolele XII, XIV); Hamermesch (1966); Kaplan (1969); Sușcinski (1969); Noks și Gold (1970); Streitwolf (1971); Bhagavantam (1966).

§ 48. TENSORI IZOTROPI ȘI TENSORI GIROTROPI

Se numesc *tensori izotropi* tensorii invarianți față de grupul $\infty\infty m$, iar *tensori girotropi*, cei invarianți față de grupul $\infty\infty$. Este limpede că astfel de tensori pot descrie proprietățile mediilor izotrope și girotrope. Metoda verificării directe a lui Fumi este, în general, inaplicabilă unor astfel de tensori, iar aplicarea meto-

dei medierii în raport cu grupul este şi ea relativ dificilă, dat fiind că este legată de integrarea pe întreg grupul. Pe de altă parte, tensorii izotropi şi girotropi şi pseudotensorii se deduc uşor cu ajutorul teoriei invarianţilor algebrici.

Evident orice tensor de forma

$$\delta_{i_1 i_2} \delta_{i_3 i_4} \ldots \delta_{i_{r-1} i_r} \tag{48.1}$$

este izotrop, ca toţi izomerii săi. Este izotropă, prin urmare, şi orice combinaţie liniară a unor astfel de izomeri. Este adevărată şi teorema reciprocă: orice tensor izotrop de rangul r poate fi reprezentat ca o combinaţie liniară a tuturor izomerilor posibili ai tensorului (48.1) (Gurevici, 1948). Această teoremă rezolvă complet problema construirii formei generale a tensorilor izotropi.

Toţi tensorii izotropi de rangul doi au forma

$$T_{ij} = a\delta_{ij}. \tag{48.2}$$

Deoarece tensorul Kronecker, δ_{ij}, este simetric în raport cu indicii, simetria exterioară $\infty\infty m$ a unui tensor de rangul doi determină deja simetria internă, $[V^2]$, a acestui tensor*.

Un tensor izotrop de rangul patru este o combinaţie liniară de izomeri ai tensorului $\delta_{ij}\delta_{kl}$

$$T_{ijkl} = a\delta_{ij}\delta_{kl} + b\delta_{ik}\delta_{jl} + c\delta_{il}\delta_{jk}. \tag{48.3}$$

Toate componentele diferite de zero ale acestui tensor,

$$\begin{aligned} &T_{1111} = T_{2222} = T_{3333} = a + b + c,\\ &T_{2233} = T_{3311} = T_{1122} = T_{3322} = T_{1133} = T_{2211} = a,\\ &T_{2323} = T_{3131} = T_{1212} = T_{3232} = T_{1313} = T_{2121} = b,\\ &T_{2332} = T_{3113} = T_{1221} = T_{3223} = T_{1331} = T_{2112} = c, \end{aligned} \tag{48.4}$$

* Acest fapt se utilizează în termodinamică. În § 57 se demonstrează în mod special caracterul simetric al tensorului permitivităţii dielectrice, $\varkappa$, în procesele izotermice şi în cele adiabatice; în cazul altor procese el este, în general, nesimetric. Dacă însă simetria lui internă, $[V^2]$, rezultă direct din simetria exterioară (acest fapt se produce nu numai pentru corpurile izotrope, ci şi pentru sistemele cubic şi rombic precum şi pentru subsistemele superioare ale sistemelor trigonal, tetragonal şi rombic şi pentru texturi), atunci urmează că pentru mediile cu simetria corespunzătoare, demonstraţia termodinamică a caracterului simetric al tensorului permitivităţii dielectrice este evidentă, în plus, deosebit de important fiind faptul că acest tensor este simetric, nu numai în cazul proceselor izotermice şi celor adiabatice, ci în general pentru orice procese.

sînt legate între ele prin relaţia

$$T_{1111} = T_{2233} = T_{2323} = T_{2332}. \tag{48.5}$$

Simetria internă a acestui tensor se exprimă prin egalităţile

$$T_{ijkl} = T_{klij} = T_{jilk} = T_{lkji}. \tag{48.6}$$

În cristalografia teoretică se utilizează tensori de rangul patru cu simetria internă $[[V^2]^2]$, $[V^2]^2$, $[V^4]$ şi $V[V^3]$. Să stabilim forma generală a tensorilor izotropi corespunzători.

Un tensor izotrop de rangul patru, invariant faţă de permutarea primilor doi indici şi a ultimilor doi precum şi faţă de permutarea dintre prima şi a doua pereche de indici, trebuie să satisfacă, în afară de relaţia (48.6), şi egalitatea $T_{ijkl}=T_{jikl}$, pentru aceasta fiind necesar ca $b = c$. Din această cauză, forma generală a unui tensor izotrop, de simetrie internă $[[V^2]^2]$ este următoarea

$$T_{ijkl} = a\delta_{ij}\delta_{kl} + b(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}). \tag{48.7}$$

Simetria internă a lui $[V^2]^2$ este mai mică decît a lui $[[V^2]^2]$, adică orice tensor, invariant faţă de grupul simetriei interne, $[[V^2]^2]$, este invariant şi faţă de grupul $[V^2]^2$. Totuşi, din tabelele 47.1,a şi 47.1,b rezultă că numărul de componente independente, în cazul tensorilor izotropi de simetrie internă $[[V^2]^2]$ şi $[V^2]^2$, este acelaşi (fiind egal cu doi). Din compararea acestor două fapte rezultă că şi forma generală a acestor tensori este aceeaşi. Prin urmare, forma generală a tensorilor izotropi de simetrie internă $[V^2]^2$ este definită tot prin formula (48.7).

Din aceleaşi cauze, formula (48.7) este valabilă şi pentru tensorii izotropi de simetrie internă $V^2[V^2]$.

Complet analog se obţine şi forma generală a tensorilor izotropi de simetrie internă $[V^4]$ şi $V[V^3]$

$$T_{ijkl} = a(\delta_{ij}\,\delta_{kl} + \delta_{ik}\,\delta_{jl} + \delta_{il}\,\delta_{jk}). \tag{48.8}$$

Un tensor izotrop obişnuit, de rangul şase, apare ca o combinaţie liniară a 15 izomeri. Să calculăm, de exemplu, forma unui tensor izotrop de simetrie internă $[[V^2]^3]$:

$$\begin{aligned} L_{ijklmn} = {} & a\delta_{ij}\,\delta_{kl}\,\delta_{mn} + b(\delta_{ij}\,\delta_{km}\,\delta_{ln} + \delta_{ij}\,\delta_{kn}\,\delta_{lm} + \delta_{im}\,\delta_{kl}\,\delta_{jn} + \\ & + \delta_{in}\,\delta_{kl}\,\delta_{jm} + \delta_{ik}\,\delta_{jl}\,\delta_{mn} + \delta_{il}\,\delta_{jk}\,\delta_{mn}) + c(\delta_{ik}\,\delta_{jm}\,\delta_{ln} + \delta_{ik}\,\delta_{jn}\,\delta_{lm} + \\ & + \delta_{il}\,\delta_{jm}\,\delta_{kn} + \delta_{il}\,\delta_{jn}\,\delta_{km} + \delta_{im}\,\delta_{jk}\,\delta_{ln} + \delta_{im}\,\delta_{jl}\,\delta_{kn} + \\ & + \delta_{in}\,\delta_{jk}\,\delta_{lm} + \delta_{in}\,\delta_{jl}\,\delta_{km}); \end{aligned} \tag{48.9}$$

coeficienţii a, b, c se exprimă prin componentele lui

$$a = L_{112233}, \quad b = \frac{1}{2}(L_{112222} - L_{112233}),$$

$$c = \frac{1}{8}(L_{111111} + 2L_{112233} - 3L_{112222}). \tag{48.10}$$

Tensorii izotropi de rang mai mare — opt, zece etc. — pot fi construiţi cu ajutorul aceleiaşi metode, însă, spre deosebire de cazurile studiate, numărul de izomeri liniar independenţi, L_r, ai tensorului (48.1), pentru $r \geqslant 8$, va fi mai mic decît numărul lor total, $N_r = r!/2^n\, n!$ (rangul tensorului este $r = 2n$). Aceasta face ca coeficienţii izomerilor să nu poată fi determinaţi univoc, punîndu-se astfel problema suplimentară a dezvoltării unui tensor izotrop după combinaţii liniar independente ale izomerilor tensorului (48.1). O problemă analoagă apare şi pentru pseudotensorii izotropi, metoda de rezolvare a ei fiind analizată mai jos, luînd ca exemplu cel mai simplu caz.

Pseudotensorii izotropi au, spre deosebire de tensorii izotropi, rang impar. Orice pseudotensor izotrop de rang r poate fi reprezentat sub formă de combinaţie liniară a izomerilor pseudotensorului

$$\delta_{i_1 i_2 i_3}\, \delta_{i_4 i_5} \ldots \delta_{i_{r-1} i_r}, \tag{48.11}$$

$\delta_{i_1 i_2 i_3}$ fiind pseudotensorul Levi-Civita. Numărul acestor izomeri va fi $N_r = r!/3!\, 2^n\, n!$, unde rangul este $r = 2n + 3$. În tabelul ce urmează, pentru fiecare rang r este dat numărul N_r de tensori izotropi de forma (48.1), sau de pseudotensori izotropi de forma (48.11) precum şi numărul L_r de izomeri liniar independenţi (pentru calculul lui L_r se utilizează metodele teoriei reprezentărilor grupurilor; vezi, de exemplu, Liubarski, 1957):

$r =$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10,
$N_r =$	0	1	1	3	10	15	105	105	1260	945,
$L_r =$	0	1	1	3	6	15	36	91	232	603.

Acest tabel arată că încă de la rangul cinci un pseudotensor izotrop este neraţional să fie reprezentat sub forma

$$P_{ijklm} = A\delta_{ijk}\,\delta_{lm} + B\delta_{ijl}\,\delta_{km} + C\delta_{ijm}\,\delta_{kl} + D\delta_{ikl}\,\delta_{jm} +$$
$$+ E\delta_{ikm}\,\delta_{jl} + F\delta_{ilm}\,\delta_{jk} + G\delta_{jkl}\,\delta_{im} + H\delta_{jkm}\,\delta_{il} + K\delta_{jlm}\,\delta_{ik} + L\delta_{klm}\,\delta_{il}, \tag{48.12}$$

pentru că cei zece izomeri scrişi, fiind legaţi între ei prin patru relaţii liniare, coeficienţii $A, \ldots, L$ nu pot fi univoc determinaţi. Să dezvoltăm acest pseudotensor după termeni simetrici şi termeni antisimetrici

$$P_{ijklm} = P_{(ij)k(lm)} + P_{[ij]k(lm)} + P_{(ij)k[lm]} + P_{[ij]k[lm]}. \quad (48.13)$$

Primul termen este dat direct de (48.12)

$$P_{(ij)k(lm)} = a(\delta_{ikl}\,\delta_{jm} + \delta_{ikm}\,\delta_{jl} + \delta_{jkl}\,\delta_{im} + \delta_{jkm}\,\delta_{il}). \quad (48.14)$$

Pentru dezvoltarea celui de al doilea termen se utilizează relaţia dualităţii $\varepsilon\{V^2\}\,V[V^2] \sim V^2[V^2]$. Deoarece tensorul izotrop de simetrie internă $V^2[V^2]$ este dat de formula (48.7), pseudotensorul dual lui, $P_{[ij]k(lm)}$ este egal cu

$$P_{[ij]k(lm)} = \delta_{ijn}\,[b\delta_{nk}\,\delta_{lm} + c(\delta_{nl}\,\delta_{km} + \delta_{nm}\,\delta_{kl})] =$$

$$= b\delta_{ijk}\,\delta_{lm} + c(\delta_{ijl}\,\delta_{km} + \delta_{ijm}\,\delta_{kl}). \quad (48.15)$$

Exact la fel găsim şi dezvoltarea celui de al treilea termen

$$P_{(ij)k[lm]} = d\delta_{klm}\,\delta_{ij} + e(\delta_{ilm}\,\delta_{jk} + \delta_{jlm}\,\delta_{ik}). \quad (48.16)$$

În sfîrşit, pentru scrierea celui de al patrulea termen, folosim relaţia $\varepsilon\{V^2\}\,V\{V^2\} \sim \varepsilon V^3$. Ea arată că pseudotensorul $P_{[ij]k[lm]}$ se poate exprima cu ajutorul unui pseudotensor de rangul trei. Deoarece $P_{[ij]k[lm]}$ este izotrop, pseudotensorul de rangul trei va fi tot izotrop şi, prin urmare, va fi de forma $f\delta_{pkq}$. Deci

$$P_{[ij]k[lm]} = f\delta_{ijp}\,\delta_{pkq}\,\delta_{qlm} = f\delta_{ijp}(\delta_{pl}\,\delta_{km} - \delta_{pm}\,\delta_{kl}) = f(\delta_{ijl}\,\delta_{km} - \delta_{ijm}\,\delta_{kl}). \quad (48.17)$$

Adunînd egalităţile (48.14) — (48.17), obţinem pentru pseudotensorul P_{ijklm} dezvoltarea

$$P_{ijklm} = a(\delta_{ikl}\,\delta_{jm} + \delta_{ikm}\,\delta_{jl} + \delta_{jkl}\,\delta_{im} + \delta_{jkm}\,\delta_{il}) + b\delta_{ijk}\,\delta_{lm} +$$

$$+ (c + f)\,\delta_{ijl}\,\delta_{km} + (c - f)\,\delta_{ijm}\delta_{kl} + d\delta_{klm}\delta_{ij} + e(\delta_{ilm}\,\delta_{jk} + \delta_{jlm}\,\delta_{ik}) \quad (48.18)$$

care, spre deosebire de (48.12) se exprimă prin şase coeficienţi independenţi, $a, \ldots, f$. Sensul transformărilor efectuate constă în aceea că dezvoltarea pseudotensorului P_{ijklm} după termeni simetrici



și antisimetrici a permis aplicarea acestora din urmă relațiilor dualității, ceea ce a dat posibilitatea scrierii lui fără coeficienți inutili.

Deoarece grupul rotațiilor, $\infty\infty$, este un subgrup al grupului ortogonal $\infty\infty m$, toți tensorii și pseudotensorii, invarianți față de grupul ortogonal, adică izotropi, vor fi invarianți și față de grupul rotațiilor. Există însă și tensori, care, fiind invarianți față de grupul rotațiilor nu sînt totuși invarianți și față de grupul ortogonal. Asemenea tensori se numesc *tensori girotropi*. Toți tensorii girotropi au rang impar. Orice tensor girotrop de rangul r poate fi reprezentat sub formă de combinație liniară a izomerilor unui tensor

$$e_{i_1 i_2 i_3} \delta_{i_4 i_5} \dots \delta_{i_{r-1} i_r}; \qquad (48.19)$$

tensorul $\mathbf{e}$, antisimetric în raport cu toți cei trei indici, este prezentat amănunțit în § 42. În sfîrșit, pseudotensorii girotropi sînt de rang par; orice pseudotensor de rang r, de acest fel, poate fi reprezentat sub formă de combinație liniară a izomerilor pseudotensorului

$$\psi \delta_{i_1 i_2} \dots \delta_{r-1\, i_r}, \qquad (48.20)$$

unde ψ este un pseudotensor unitar, egal cu 1 într-un sistem de coordonate drept și cu -1 într-un sistem stîng.

Formulele (48.11) și (48.19) sînt liniare în raport cu peudotensorul δ_{ijk} și, respectv, cu tensorul e_{ijk}. Aceasta se explică prin faptul că combinațiile pătratice, formate din aceste mărimi, se exprimă, conform teoremei relativ la tensorii izotropi, prin tensorii Kronecker. În particular, pentru pseudotensorul Levi-Civita sînt valabile formulele

$$\delta_{ijk} \delta_{lmn} = \begin{vmatrix} \delta_{il} & \delta_{im} & \delta_{in} \\ \delta_{jl} & \delta_{jm} & \delta_{jn} \\ \delta_{kl} & \delta_{km} & \delta_{kn} \end{vmatrix}, \qquad (48.21)$$

$$\delta_{ijm} \delta_{klm} = \delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{il} \delta_{jk}, \qquad (48.22)$$

$$\delta_{ikl} \delta_{jkl} = 2\delta_{ij}, \qquad (48.23)$$

$$\delta_{ijk} \delta_{ijk} = 6. \qquad (48.24)$$

Aceleași formule sînt adevărate și pentru combinațiile pătratice analoage, formate din componentele tensorului e_{ijk}. Formulele (48.21) — (48.24) pot fi utilizate și pentru combinațiile pătratice mixte : $\delta_{ijk} e_{lmn}$, $\delta_{ijm} e_{klm}$ etc., în acest caz însă membrii din dreapta trebuind să fie înmulțiți cu pseudoscalarul unitar ψ.

CAPITOLUL 6

ELASTICITATEA CRISTALELOR

§ 49. DEFORMĂRI MICI ALE MEDIULUI CONTINUU

În cazul deformării mediului continuu — indiferent dacă acesta este izotrop sau anizotrop — particulele mediului se deplasează, în general, din pozițiile lor inițiale : o particulă care se afla pînă la deformare în punctul $\boldsymbol{r}$, de coordonate x_i, va ajunge, datorită deformării, în punctul $\boldsymbol{r}'$, de coordonate x_i'. Vectorul

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}, \qquad u_i = x_i' - x_i \tag{49.1}$$

se numește *vectorul deplasare*. Evident, dacă în întregul volum ocupat de corp este definit un cîmp vectorial, $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})$, atunci starea deformată a corpului este complet determinată. Însă pentru o descriere mai intuitivă a deformării este mai convenabil să se utilizeze alte cîmpuri vectoriale și tensoriale deduse din cîmpul deplasării. Pentru a reprezenta deformarea unui mediu continuu, trebuie analizată o particulă a mediului împreună cu vecinătatea infinit mică a ei. Deformarea corpului din apropierea particulei date este convenabil să o reprezentăm descompusă în următoarele trei mișcări : 1) o mișcare de translație a particulei, împreună cu vecinătatea sa, dintr-un punct $\boldsymbol{r}$ în punctul $\boldsymbol{r}'$; 2) o rotație a vecinătății ca corp solid, în jurul unei anumite axe, care trece prin particulă, adică prin punctul $\boldsymbol{r}'$; 3) o deformare propriu-zisă, adică o astfel de deplasare a unor particule ale vecinătății față de celelalte, încît distanța dintre particule se modifică.

Mișcarea de translație a particulei împreună cu vecinătatea este definită de vectorul $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})$. Celelalte două mișcări sînt determinate de derivatele în funcție de coordonate ale vectorului deplasare. Aceste două derivate constituie *tensorul distorsiunii*, $\gamma = \partial\boldsymbol{u}/\partial\boldsymbol{r}$, de componente $\gamma_{ik} = \partial u_i/\partial x_k$, fiind, în general, un tensor antisimetric. Tensorul distorsiunii se poate descompune, folosind tensorul transpus, $\gamma^* = \text{Grad}\ \boldsymbol{u}$, într-o parte simetrică,

$$\varepsilon = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{r}} + \text{Grad}\ \boldsymbol{u}\right) = \text{Def}\ \boldsymbol{u}, \quad \varepsilon_{ik} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right), \tag{49.2}$$

denumită *tensorul micilor deformări*, şi o parte antisimetrică,

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{r}} - \text{Grad } \boldsymbol{u}\right), \qquad \omega_{ik} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right), \tag{49.3}$$

denumită *tensorul micilor rotaţii*. În cazul unor deformări ale cristalelor, care nu le afectează integritatea, toate componentele tensorului distorsiunii vor fi, de obicei, mici : $|\gamma_{ik}| \ll 1$, fiind deci mici şi toate componentele tensorilor $\boldsymbol{\varepsilon}$ şi $\boldsymbol{\omega}$. Numai asemenea deformări vor fi analizate.

În vecinătatea particulei materiale, care înainte de deformare se afla în punctul $\boldsymbol{r}$, deplasările sînt egale cu

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}) + \frac{\partial \boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}} \cdot \delta\boldsymbol{r} = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{\omega} \cdot \delta\boldsymbol{r} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \delta\boldsymbol{r},$$

$$u_i(\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}) = u_i(\boldsymbol{r}) + \frac{\partial u_i(\boldsymbol{r})}{\partial x_k}\delta x_k = u_i(\boldsymbol{r}) + \omega_{ik}\,\delta x_k + \varepsilon_{ik}\,\delta x_k. \tag{49.4}$$

Aici $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{r})$ şi $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{r})$. Deplasările $\delta\boldsymbol{u}$ ale particulelor vecinătăţii faţă de particula aleasă de noi, care se afla pînă în momentul deformării în punctul $\boldsymbol{r}$, sînt egale cu

$$\delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}) - \boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{\omega} \cdot \delta\boldsymbol{r} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \delta\boldsymbol{r},$$

$$\delta u_i(\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}) = u_i(\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}) - u_i(\boldsymbol{r}) = \omega_{ik}\,\delta x_k + \varepsilon_{ik}\,\delta x_k. \tag{49.5}$$

După cum s-a arătat în § 42, unui tensor antisimetric, $\boldsymbol{\omega}$, i se poate pune în corespondenţă vectorul axial $\mathring{\boldsymbol{\varphi}}$, dualul său, denumit *vectorul micilor rotaţii*, de componente

$$\varphi_i = -\frac{1}{2}\,\delta_{ijk}\,\omega_{jk}, \tag{49.6}$$

iar

$$\boldsymbol{\omega} \cdot \delta\boldsymbol{r} = \mathring{\boldsymbol{\varphi}} \times \delta\boldsymbol{r}.$$

Rezultă că

$$\delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}) = \mathring{\boldsymbol{\varphi}} \times \delta\boldsymbol{r} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \delta\boldsymbol{r}. \tag{49.7}$$

Pentru a elucida sensul geometric al tensorului micilor rotaţii, vom presupune că $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{r}) = 0$. Dacă $\delta\rho$ este o componentă a vectorului $\delta\boldsymbol{r}$, perpendiculară pe vectorul $\mathring{\boldsymbol{\varphi}}$, atunci

$$\delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}) = \mathring{\boldsymbol{\varphi}} \times \delta\boldsymbol{\rho}\,; \qquad \delta u = \rho\,\delta\rho.$$

Însă aceasta înseamnă că deplasarea fiecărui punct al vecinătăţii, $\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}$, este proporţională cu distanţa $\delta\boldsymbol{\rho}$ de la punctul $\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}$ pînă la axa care trece prin punctul $\boldsymbol{r}$, paralelă cu vectorul $\overset{\circ}{\boldsymbol{\varphi}}$. Totodată, direcţia acestei deplasări este perpendiculară atît pe axă, cît şi pe vectorul $\delta\boldsymbol{\rho}$, care uneşte această axă cu punctul considerat al vecinătăţii. Este evident că aceasta înseamnă rotaţia întregii vecinătăţi ca un întreg în jurul axei de rotaţie. Nu prezintă nici o dificultate, de asemenea, să ne convingem că atît unghiul (în radiani), cît şi sensul acestei rotaţii coincid cu lungimea şi, respectiv, cu direcţia vectorului axial, $\overset{\circ}{\boldsymbol{\varphi}}$.

Substituind în (46.9) componentele tensorului micilor rotaţii, (49.3), obţinem

$$\varphi_i = -\frac{1}{4}\delta_{ijk}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \frac{\partial u_k}{\partial x_j}\right) = \frac{1}{4}\delta_{ijk}\frac{\partial u_k}{\partial x_j} - \frac{1}{4}\delta_{ijk}\frac{\partial u_j}{\partial x_k}.$$

În al doilea termen schimbăm între ei locul indicilor muţi, aplicînd apoi identitatea $\delta_{ikj} = -\delta_{ijk}$

$$-\frac{1}{4}\delta_{ijk}\frac{\partial u_j}{\partial x_k} = -\frac{1}{4}\delta_{ikj}\frac{\partial x_k}{\partial x_j} = \frac{1}{4}\delta_{ijk}\frac{\partial u_k}{\partial x_j}.$$

Deci,

$$\varphi_i = \frac{1}{2}\delta_{ijk}\frac{\partial u_k}{\partial x_j}, \quad \overset{\circ}{\boldsymbol{\varphi}} = \frac{1}{2}\operatorname{rot}\boldsymbol{u}. \tag{49.8}$$

Pentru elucidarea sensului geometric al tensorului $\boldsymbol{\varepsilon}$ vom lua $\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{r}) = 0$. Atunci

$$\delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\delta\boldsymbol{r}.$$

Ca orice tensor simetric de rangul doi, $\boldsymbol{\varepsilon}$ poate fi scris sub forma

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_{(1)}\,\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1 + \varepsilon_{(2)}\,\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2 + \varepsilon_{(3)}\,\boldsymbol{p}_3\boldsymbol{p}_3 \qquad (\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{p}_j = \delta_{ij}).$$

Vom considera mai întîi cazul în care

$$\varepsilon_{(1)} = \varepsilon \neq 0, \; \varepsilon_{(2)} = \varepsilon_{(3)} = 0.$$

Notăm $\boldsymbol{p}_1\cdot\delta\boldsymbol{r} = \delta x_1$. Evident, în acest caz,

$$\delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}) = \varepsilon\,\delta x_1\,\boldsymbol{p}_1.$$

Aceasta înseamnă că deplasările tuturor punctelor vecinătății sînt paralele cu vectorul $\boldsymbol{p}_1$, fiind proporționale cu distanțele dintre punctele corespunzătoare și planul perpendicular pe acest vector, $\delta x_1 = 0$. Prin urmare, în acest caz se produce o alungire în direcția paralelă cu $\boldsymbol{p}_1$, în raportul $(1 + \varepsilon):1$.

În cazul general, cînd toate valorile proprii ale tensorului ε sînt diferite de zero, se produce o suprapunere de astfel de alungiri după trei direcții rectangulare, așa cum se arată în figura 49.1.

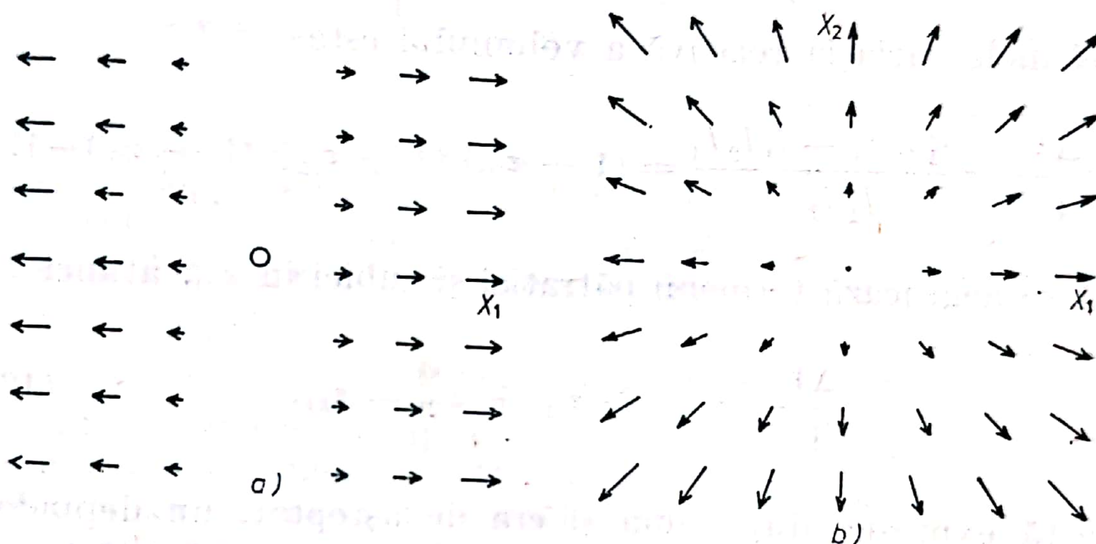


Fig. 49.1. Cîmpurile vectorului deplasare, $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})$, pentru diferite deformări omogene: *a)* $\varepsilon = 0{,}2\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_1$; *b)* $\varepsilon = 0,\ 2(\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2\boldsymbol{e}_2)$; *c)* $\varepsilon = 0{,}2\ (\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2\boldsymbol{e}_2)$; *d)* $\varepsilon = 0{,}2\ (\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_2\boldsymbol{e}_1)$.

Să studiem cum variază distanțele după direcția unui vector unitar, oarecare, $\boldsymbol{n}$. Pentru aceasta va trebui să calculăm cum variază, ca urmare a deformării, distanța dintre punctul $\boldsymbol{r}$ și punctul $\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}$, cînd $\delta\boldsymbol{r} = \boldsymbol{n}\delta s$. Înaintea deformării această distanță era egală cu δs. Ca urmare a deformării, punctul $\boldsymbol{r} + \boldsymbol{n}\delta s$ se deplasează față de punctul $\boldsymbol{r}$ cu vectorul $\delta\boldsymbol{u} = \varepsilon\cdot\boldsymbol{n}\delta s$. Componenta acestui vector în direcția $\boldsymbol{n}$ este egală cu

$$\boldsymbol{n}\cdot\delta\boldsymbol{u} = \boldsymbol{n}\cdot\varepsilon\cdot\boldsymbol{n}\cdot\delta s.$$

Variația relativă a distanței în direcția $\boldsymbol{n}$, ca rezultat al micii deformări, ε, este deci

$$\frac{\boldsymbol{n}\cdot\delta\boldsymbol{u}}{\delta s} = \boldsymbol{n}\cdot\varepsilon\cdot\boldsymbol{n} = \varepsilon_{ik}\, n_i\, n_k, \tag{49.9}$$

$\boldsymbol{n}$ fiind vectorul unitar.

Este interesant de calculat şi variaţia, în cadrul deformării, a volumului. Dacă în vecinătatea punctului $\boldsymbol{r}$ luăm un paralelipiped mic, cu muchiile paralele cu vectorii proprii ai tensorului $\boldsymbol{\varepsilon}$ (această presupunere se face numai pentru simplificarea calculelor; s-ar fi putut studia un mic paralelipiped complet arbitrar, rezultatul fiind acelaşi) şi egale cu l_1, l_2, l_3, atunci ca rezultat al deformării, el se va transforma tot într-un paralelipiped cu laturile

$$l_1' = (1 + \varepsilon_{(1)})l_1, \quad l_2' = (1 + \varepsilon_{(2)})l_2, \quad l_3' = (1 + \varepsilon_{(3)})l_3,$$

astfel încît variaţia relativă a volumului este

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{l_1' l_2' l_3' - l_1 l_2 l_3}{l_1 l_2 l_3} = (1 + \varepsilon_{(1)})\,(1 + \varepsilon_{(2)})\,(1 + \varepsilon_{(3)}) - 1.$$

Dacă se neglijează termenii pătratici şi cubici în $\varepsilon_{(i)}$, atunci

$$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{(1)} + \varepsilon_{(2)} + \varepsilon_{(3)} = \varepsilon_{kk}. \tag{49.10}$$

Această expresie, după cum şi era de aşteptat, nu depinde de alegerea sistemului de coordonate, fiind un invariant al tensorului deformării. Expresia poate fi exprimată prin vectorul deplasare

$$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{kk} = \frac{\partial u_k}{\partial x_k} = \operatorname{div} \boldsymbol{u}. \tag{49.11}$$

Este instructiv şi calculul variaţiei, ca urmare a deformării, a unghiului dintre doi vectori unitari, $\boldsymbol{p}$ şi $\boldsymbol{q}$, care iniţial erau ortogonali ($\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q} = 0$). După deformare, cosinusul unghiului dintre ei este aproximativ egal cu

$$\cos\,\theta \approx (\boldsymbol{p} + \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p})\cdot(\boldsymbol{q} + \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{q}) \approx 2\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{q}$$

(am folosit aici nu numai faptul că tensorul $\boldsymbol{\varepsilon}$ este mic, ci şi faptul că el este simetric). Prin urmare,

$$\theta \approx \frac{\pi}{2} - 2\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{q}. \tag{49.12}$$

Partea sferică, $1/3\,\varepsilon_{kk}\,\mathbf{I}$, a tensorului deformărilor, $\boldsymbol{\varepsilon}$, defineşte o aceeaşi variaţie a volumului ca şi tensorul deformărilor

însuşi, însă aplicarea tensorului sferic nu schimbă forma: toate dreptele care erau ortogonale pînă la deformare, rămîn la fel şi după aceasta: dacă $\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{q} = 0$, atunci şi

$$\boldsymbol{p} \cdot \frac{1}{3} \varepsilon_{kk} \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{q} = \frac{1}{3} \varepsilon_{kk} \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{q} = 0.$$

Din contra, deviatorul tensorului deformărilor,

$$\mathbf{e} = \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{3} \varepsilon_{kk} \mathbf{I}, \quad e_{ij} = \varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} \varepsilon_{kk} \delta_{ij}, \tag{49.13}$$

defineşte deformarea care se produce fără variaţia volumului (deoarece $e_{kk} = 0$); modificările însă ale formei, adică modificarea unghiurilor, iniţial drepte, dintre vectorii ortogonali, sub acţiunea deformărilor $\boldsymbol{\varepsilon}$ şi $\mathbf{e}$, sînt aceleaşi: dacă $\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{q} = 0$, atunci

$$\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{q} = \boldsymbol{p} \cdot \mathbf{e} \cdot \boldsymbol{q}.$$

Fiind dat orice cîmp al deplasărilor, $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})$, se poate determina cîmpul deformaţiilor, $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathrm{Def}\, \boldsymbol{u}$. Se pune problema dacă cîmpul vectorial $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})$ poate fi reconstituit plecînd de la orice cîmp tensorial, $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{r})$, cu alte cuvinte, dacă orice cîmp tensorial este o deformaţie a unui anumit cîmp vectorial (se presupune că u_i şi ε_{jk} sînt nişte funcţii de coordonate suficient de netede). O situaţie asemănătoare apare şi în electrostatică: oricărei funcţii scalare, $\varphi(\boldsymbol{r})$, îi corespunde un cîmp vectorial, $\boldsymbol{E} = -\operatorname{grad} \varphi$, dar nici pe departe orice cîmp vectorial nu va fi gradientul unui anumit cîmp scalar; după cum se ştie, pentru aceasta, cîmpul vectorial trebuie să fie fără vîrtejuri: $\operatorname{rot} \boldsymbol{E} = 0$. Ne putem aştepta ca şi cîmpul tensorial, pentru a servi drept deformaţie unui cîmp vectorial oarecare, să fie necesar să satisfacă anumite condiţii. Să le deducem.

Să examinăm cazul Rot $\boldsymbol{\varepsilon}$. Conform definiţiei,

$$(\mathrm{Rot}\ \boldsymbol{\varepsilon})_{ij} = \delta_{ilk} \frac{\partial \varepsilon_{lj}}{\partial x_k}. \tag{49.14}$$

Vom exprima componentele acestui pseudotensor prin derivateie vectorului deplasare

$$\delta_{ikl} \frac{\partial \varepsilon_{lj}}{\partial x_k} = \frac{1}{2} \delta_{ikl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_k \partial x_j} + \frac{1}{2} \delta_{ikl} \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_k \partial x_l}.$$

Termenul al doilea este identic egal cu zero, deoarece funcţia $u_j(\boldsymbol{r})$ satisface cerinţele teoremei asupra schimbării ordinii de diferenţiere. Într-adevăr, în acest caz, tensorul $\partial^2 u_j/\partial x_k\, \partial x_l$ este simetric în raport cu indicii k şi l. Tensorul δ_{ikl} este însă antisimetric în raport cu aceşti indici. De aici se vede imediat că

$$\delta_{ikl} = \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_k \partial x_l} = 0.$$

Dar

$$\delta_{ikl} \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_k\, \partial x_l} = (\text{Rot Grad } \boldsymbol{u})_{ij},$$

astfel încît am obţinut formula din analiza tensorială

$$\text{Rot Grad} = 0. \tag{49.15}$$

Remarcînd că

$$\delta_{ikl} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} = (\text{rot } \boldsymbol{u})_i,$$

vom transcrie (49.14) în forma

$$(\text{Rot } \boldsymbol{\varepsilon})_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial (\text{rot } \boldsymbol{u})_i}{\partial x_j}, \quad \text{Rot } \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \frac{\partial (\text{rot } \boldsymbol{u})}{\partial \boldsymbol{r}}, \tag{49.16}$$

Pe de altă parte, 1/2 rot $\boldsymbol{u} = \mathring{\boldsymbol{\varphi}}$. Obţinem astfel o formulă foarte importantă

$$(\text{Rot } \boldsymbol{\varepsilon})_{ij} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j}, \qquad \text{Rot } \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\partial \mathring{\boldsymbol{\varphi}}}{\partial \boldsymbol{r}}. \tag{49.17}$$

Această formulă este importantă prin ea însăşi şi vom mai apela la ea. Acum se deduce uşor relaţia căutată. Transpunem ambele părţi ale egalităţii (49.17). Obţinem

$$(\text{Rot } \boldsymbol{\varepsilon})^* = \text{Grad } \mathring{\boldsymbol{\varphi}}.$$

Aplicăm acum ambelor părţi ale egalităţii obţinute operaţia Rot. Deoarece

$$\text{Rot } (\text{Rot } \boldsymbol{\varepsilon})^* = \text{Ink } \boldsymbol{\varepsilon}$$

şi, aşa cum s-a menţionat deja,

$$\mathrm{Rot\ Grad} = 0,$$

vom obţine în final

$$\mathrm{Ink}\ \varepsilon = 0, \quad \delta_{ikm}\,\delta_{jln}\frac{\partial^2 \varepsilon_{mn}}{\partial x_k \partial x_l} = 0. \tag{49.18}$$

Am demonstrat astfel că dacă un cîmp tensorial este o deformare a unui anumit cîmp vectorial, atunci incompatibilitatea se anulează. Ecuaţia (49.18) se numeşte *ecuaţia de compatibilitate Saint-Venant.*

Să examinăm ecuaţia de compatibilitate a deformărilor pentru cazul în care tensorul deformărilor depinde numai de o singură coordonată, să zicem de x_3. Atunci

$$\frac{\mathrm{d}^2\varepsilon_{11}}{\mathrm{d}x_3^2} = \frac{\mathrm{d}^2\varepsilon_{22}}{\mathrm{d}x_3^2} = \frac{\mathrm{d}^2\varepsilon_{12}}{\mathrm{d}x_3^2} = 0, \tag{49.19}$$

iar celelalte trei ecuaţii de compatibilitate sînt satisfăcute identic. Din ecuaţiile (49.19) rezultă că ε_{11}, ε_{22}, şi ε_{12} depind liniar de x_3

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = A_{\alpha\beta} + B_{\alpha\beta}x_3 \quad (\alpha,\beta = 1,2;\ A_{\alpha\beta} = A_{\beta\alpha},\ B_{\alpha\beta} = B_{\beta\alpha}). \tag{49.20}$$

În cazul în care tensorul deformărilor depinde numai de o singură coordonată, toate ecuaţiile de compatibilitate se reduc la relaţiile (49.20).

§ 50. TENSORUL TENSIUNILOR

Cînd un cristal este deformat apar forţe care tind să restabilească configuraţia iniţială. Aceste forţe, după cum arată teoria reţelei cristaline, sînt forţe cu rază de acţiune mică, raza efectivă de acţiune a lor, nedepăşind cîteva constante de reţea (aici nu avem în vedere cristalele piezoelectrice, ale căror proprietăţi vor fi studiate separat). Volumele elementare, utilizate în teoria mediilor continue, fiind însă mari în comparaţie cu celulele elementare ale unui cristal, trebuie considerat că forţa care acţionează ca rezultat al deformării asupra oricărui volum pe care ni-l imaginăm în cristal, se transmite numai prin suprafaţa care mărgineşte acest volum. Atunci starea de tensiune din orice punct (prin punct, ca totdeauna în mecanica mediilor continue, se înţelege un volum elementar) al cristalului este definită de totalitatea for-

țelor, $\boldsymbol{P}\mathrm{d}S$, care acționează asupra tuturor suprafețelor posibile care trec prin acest punct, avînd vectorul unitar al normalei exterioare, $\boldsymbol{n}$, și aria $\mathrm{d}S$ (vectorul $\boldsymbol{P}$ are dimensiunea unei tensiuni mecanice : forță/suprafață).

Prin urmare, starea de tensiune dintr-un punct se definește prin funcția $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{n})$ sau, introducînd notațiile

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{P}\mathrm{d}S, \quad \boldsymbol{N} = \boldsymbol{n}\mathrm{d}S$$

prin funcția $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{N})$. Vom demonstra că această funcție este liniară. Egalitatea $\boldsymbol{F}(\lambda\boldsymbol{N}) = \lambda\boldsymbol{F}(\boldsymbol{N})$, unde λ este un număr real arbitrar (însă nu prea mare), rezultă direct din definiția vectorilor $\boldsymbol{F}$ și $\boldsymbol{N}$. Să ne imaginăm acum că o suprafață plană, de dimensiuni mici, caracterizată prin vectorul $\boldsymbol{N}$, este înlocuită printr-o suprafață cu nervuri, foarte apropiată de ea, fiecare porțiune separată a sa caracterizîndu-se prin vectorii $\boldsymbol{N}_s$. Studiul geometric arată că în acest caz $\Sigma\boldsymbol{N}_s = \boldsymbol{N}$. Din considerente fizice este evident, pe de altă parte, că forța rezultantă, care acționează pe o suprafață de dimensiuni mici, nu poate să difere substanțial ca mărime dacă suprafața are nervuri sau este plană, deci

$$\Sigma\boldsymbol{F}(\boldsymbol{N}_s) = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{N}).$$

Reunind aceste două egalități, obținem

$$\boldsymbol{F}(\Sigma\,\boldsymbol{N}_s) = \Sigma\boldsymbol{F}(\boldsymbol{N}_s)$$

ceea ce era de demonstrat.

Deoarece vectorul $\boldsymbol{F}$ este o funcție liniară de vectorul $\boldsymbol{N}$, va exista un tensor de rangul doi, $\boldsymbol{\sigma}$, care nu depinde de $\boldsymbol{N}$, astfel încît $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{N}$ (vezi § 18), sau, revenind la notațiile inițiale,

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}, \qquad P_i = \sigma_{ij}n_j. \tag{50.1}$$

Tensorul $\boldsymbol{\sigma}$ se numește *tensorul tensiunilor*; definind complet funcția $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{n})$, el caracterizează complet starea de tensiune dintr-un punct. Pentru a găsi acest tensor este suficient să măsurăm forțele $\boldsymbol{P}^{(k)}$, care acționează pe trei suprafețe mici, care au normalele $\boldsymbol{n}^{(k)}$ necoplanare; atunci componentele σ_{ij} vor fi soluții ale sistemului de nouă ecuații liniare

$$n_j^{(k)}\,\sigma_{ij} = P_i^{(k)}. \tag{50.2}$$

Fie, în particular, normalele la suprafețe paralele cu versorii : $\boldsymbol{n}^{(k)} = \boldsymbol{e}_k$. Atunci $n_j^{(k)} = \delta_{jk}$ astfel încît sistemul (50.2) capătă forma

$$\sigma_{ik} = P_i^{(k)}. \tag{50.3}$$

Prin urmare, σ_{ik} este componenta i a forţei aplicate suprafeţei unitare, a cărei normală exterioară este orientată după axa X_k.

Deoarece forţa care acţionează pe 1 cm² de suprafaţă, avînd normala exterioară $\boldsymbol{n}$, este $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}$, componenta normală a acestei forţe va fi

$$\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{P} = \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = \sigma_{ik}\, n_i\, n_k,$$

componenta de forfecare, totală (adică cea care se află în planul suprafeţei) fiind

$$\boldsymbol{P} - \boldsymbol{nn} \cdot \boldsymbol{P} = (\mathbf{I} - \boldsymbol{nn}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}.$$

Tensiunea de forfecare după o direcţie dată, $\boldsymbol{l}$, este egală cu

$$\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = \sigma_{ik} l_i n_k;$$

vectorul unitar, $\boldsymbol{l}$, se află în planul suprafeţei, fiind deci perpendicular pe vectorul $\boldsymbol{n}$.

Să ne imaginăm că am delimitat dintr-un corp un volum oarecare, V, mărginit de suprafaţa S. Dacă asupra fiecărui element de suprafaţă dS acţionează o forţă

$$\boldsymbol{P}\mathrm{d}S = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}\mathrm{d}S,$$

atunci asupra întregului volum acţionează forţa

$$\boldsymbol{F} = \oint_S \boldsymbol{P}\mathrm{d}S = \oint_S \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}\mathrm{d}S, \quad F_i = \oint_S P_i \mathrm{d}S = \oint_S \sigma_{ik} \mathrm{n}_k \mathrm{d}S. \tag{50.4}$$

Integrala pe suprafaţa închisă poate fi, conform teoremei Gauss-Ostrogradski (vezi § 43) transformată într-o integrală după volumul mărginit de această suprafaţă

$$\boldsymbol{F} = \oint_S \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}\mathrm{d}S = \int_V \mathrm{Div}\, \boldsymbol{\sigma}^* \,\mathrm{d}V, \; F_i = \oint_S \sigma_{ik}\, \mathrm{n}_k\, \mathrm{d}S = \int_V \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}\, \mathrm{d}V. \tag{50.5}$$

Pe de altă parte, conform legii a doua a lui Newton,

$$\boldsymbol{F} = \int_V \rho \frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial t^2}\, \mathrm{d}V, \quad F_i = \int_V \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}\, \mathrm{d}V. \tag{50.6}$$



Comparînd aceste relaţii cu (50.5) obţinem

$$\int_V \mathrm{Div}\ \boldsymbol{\sigma}^*\ \mathrm{d}V = \int_V \rho \frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial t^2}\,\mathrm{d}V, \int_V \frac{\partial\,\sigma_{ik}}{\partial x_k}\,\mathrm{d}V = \int_V \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}\,\mathrm{d}V.$$

Deoarece această egalitate este satisfăcută oricum am lua volumul V, trebuie ca expresiile de sub integrale să fie egale

$$\mathrm{Div}\ \boldsymbol{\sigma}^* = \rho \frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial t^2}, \quad \frac{\partial\,\sigma_{ik}}{\partial x_k} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}. \tag{50.7}$$

Acestea sînt ecuaţiile de mişcare ale corpului elastic — aşa-numitele ecuaţii ale *elastodinamicii*, sau ecuaţiile lui *Cauchy*. Ecuaţiile de echilibru al corpului, ecuaţiile *elastostaticii*,

$$\mathrm{Div}\ \boldsymbol{\sigma}^* = 0, \qquad \frac{\partial\,\sigma_{ik}}{\partial x_k} = 0, \tag{50.8}$$

reprezintă un important caz particular al ecuaţiilor elastodinamicii. Dacă asupra unui corp acţionează încă o forţă de volum, $\boldsymbol{f}$ (dimensiunea acestui vector este forţă/volum) ea trebuie să fie adăugată părţilor stîngi ale ecuaţiilor (50.7) şi (50.8). De exemplu, în prezenţa forţelor de volum, ecuaţiile Cauchy capătă forma

$$\mathrm{Div}\ \boldsymbol{\sigma}^* + \boldsymbol{f} = \rho \frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial t^2}, \quad \frac{\partial\,\sigma_{ik}}{\partial x_k} + f_i = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}. \tag{50.9}$$

Să calculăm acum momentul forţelor care acţionează asupra volumului V, teoretic delimitat de noi, care are suprafaţa S. Considerînd forţele de volum, el va fi egal cu

$$\boldsymbol{M} = \oint_S \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{P}\mathrm{d}S + \int_V \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{f}\,\mathrm{d}V,$$

(50.10)

$$M_i = \oint_S \delta_{ijk}\, x_j\, P_k\, \mathrm{d}S + \int_V \delta_{ijk}\, x_j\, f_k\, \mathrm{d}V.$$

Efectuarea calculelor ce urmează este mai comodă în forma cu coordonate. Să împărţim forţele de suprafaţă P_k la tensorul

tensiunilor şi să transformăm integrala de suprafaţă într-o integrală de volum

$$\oint_S x_j P_k \,\mathrm{d}S = \oint_S x_j \sigma_{kl} n_l \,\mathrm{d}S = \int_V \frac{\partial (x_j \sigma_{kl})}{\partial x_l} \mathrm{d}V.$$

Observînd că

$$\frac{\partial (x_j \sigma_{kl})}{\partial x_l} = x_j \frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial x_l} + \sigma_{kl} \frac{\partial x_j}{\partial x_l},$$

iar

$$\frac{\partial x_j}{\partial x_l} = \delta_{jl},$$

precum şi

$$\sigma_{kl} = \frac{\partial x_j}{\partial x_l} = \sigma_{kj},$$

transcriem formula (50.10) în forma

$$M_i = \int_V \delta_{ijk} x_j \left(\frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial x_l} + f_k \right) \mathrm{d}V + \int_V \delta_{ijk} \sigma_{kj} \mathrm{d}V. \quad (50.11)$$

În expresia de sub prima integrală, suma care se află între paranteze este egală cu forţa care acţionează asupra unităţii de volum a corpului (de comparat cu ecuaţia (50.9)), iar întreaga expresie de sub integrală este egală cu momentul forţei. Prin urmare, întreaga acţiune a momentelor forţelor de suprafaţă şi a celor de volum asupra volumului considerat se reduc la prima integrală, iar cea de a doua trebuie să fie egală cu zero. În virtutea faptului că volumul V este arbitrar, rezultă că se anulează expresia de sub integrală

$$\delta_{ijk}\sigma_{kj} = 0. \quad (50.12)$$

Acestea sînt cele trei egalităţi care arată că tensorul tensiunilor, $\boldsymbol{\sigma}$, este simetric. Într-adevăr, dezvoltînd-o pe prima dintre ele, obţinem

$$\delta_{1jk} \sigma_{kj} = \sigma_{32} - \sigma_{23} = 0,$$

iar a doua şi a treia dau

$$\sigma_{13} - \sigma_{31} = 0, \quad \sigma_{21} - \sigma_{12} = 0.$$

În ultimul timp se studiază modele ale mediilor continue cu grade de libertate interne, în care tensorul tensiunilor poate fi și nesimetric. Să ne imaginăm, de exemplu, un mediu continuu, în care sînt implantate uniform particule care se pot roti față de mediu, iar ca urmare a unei astfel de rotații, în mediu apar forțe care tind să readucă particulele în poziția inițială. Astfel sînt, de pildă, particulele magnetizate sau cele polarizate electric, implantate în mediul continuu. Dacă unui asemenea mediu i se aplică un cîmp electric sau unul magnetic, asupra fiecărei particule va acționa un moment de rotație; suma tuturor momentelor care acționează asupra particulelor care se află în unitatea de volum se numește *momentul de volum*, $\boldsymbol{m}$. În afară de aceasta, momentul poate fi transmis prin suprafață: pe unitatea de suprafață, care are normala exterioară $\boldsymbol{n}$, acționează un moment de suprafață, $\boldsymbol{Q}$, legat de pseudotensorul momentelor tensiunilor, $\boldsymbol{\mu}$, exact la fel ca și forțele de suprafață, $\boldsymbol{P}$, cu tensorul tensiunilor, $\boldsymbol{\sigma}$,

$$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{n}.$$

Pentru un asemenea mediu, formula (50.10) se înlocuiește cu următoarea relație

$$M_i = \oint_S \delta_{ijk}\, x_j\, P_k\, \mathrm{d}S + \int_V \delta_{ijk}\, x_j\, f_k + \oint_S Q_i\, \mathrm{d}S + \int_V m_i\, \mathrm{d}V.$$

Atunci, în loc de (50.11) obținem

$$M_i = \int_V \delta_{ijk}\, x_j \left(\frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial x_l} + f_k \right) \mathrm{d}V + \int_V \left(\frac{\partial \mu_{il}}{\partial x_l} + m_i - \delta_{ijk} \sigma_{jk} \right) \mathrm{d}V.$$

Evident, expresia de sub a doua integrală are sensul de moment rezultant, care acționează asupra particulelor conținute în unitatea de volum. Datorită faptului că momentele de inerție ale particulelor sînt mici, le putem considera egale cu zero, astfel încît partea antisimetrică a tensorului tensiunilor este egală cu

$$\delta_{ijk}\, \sigma_{jk} = \frac{\partial \mu_{il}}{\partial x_l} + m_i.$$

Prin urmare, partea antisimetrică a tensorului tensiunilor echilibrează momentele de volum și momentele datorate momentelor tensiunilor. În absența momentelor de volum și a momentelor tensiunilor, tensorul tensiunilor, $\boldsymbol{\sigma}$, este simetric. Vezi, asupra acestor probleme, Aero și Kuvșinski (1960), Kuvșinski și Aero (1963), Palmov (1964).

Să deducem valorile medii ale tensorului tensiunilor

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \boldsymbol{\sigma}\, \mathrm{d}V, \quad \langle \sigma_{ik} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ik}\, \mathrm{d}V \tag{50.13}$$

și ale momentului său

$$\langle \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\sigma}\, \mathrm{d}V, \quad \langle \delta_{ijk}\, x_j\, \sigma_{kl} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \delta_{ijk}\, x_j\, \sigma_{kl}\, \mathrm{d}V \tag{50.14}$$

pentru un corp elastic, care se află în echilibru, sub acţunea sarcinilor **P** (mecanice), aplicate pe suprafaţa sa.

Să examinăm divergenţa

$$\frac{\partial}{\partial x_l}(x_k\,\sigma_{il}) = \frac{\partial x_k}{\partial x_l}\sigma_{il} + x_k\frac{\partial \sigma_{il}}{\partial x_l}.$$

Deoarece $\partial x_k/\partial x_l = \delta_{kl}$, primul termen este egal cu σ_{ik}. Al doilea termen este egal cu zero, în virtutea ecuaţiilor de echilibru. De aceea, valoarea medie a tensorului tensiunilor se exprimă prin integrala de suprafaţă

$$\langle\sigma_{ik}\rangle = \frac{1}{V}\int_V \sigma_{ik}\,\mathrm{d}V = \frac{1}{V}\int_V (x_k\,\sigma_{il})\mathrm{d}V =$$

$$= \frac{1}{V}\oint_S x_k\,\sigma_{il}\,n_l\,\mathrm{d}S = \frac{1}{V}\oint_S P_i\,x_k\,\mathrm{d}S.$$

Aşadar,

$$\langle\sigma_{ik}\rangle = \frac{1}{V}\oint_S P_i\,x_k\,\mathrm{d}S, \qquad \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \frac{1}{V}\oint_S \boldsymbol{P}\boldsymbol{r}\,\mathrm{d}S. \qquad (50.15)$$

Să examinăm acum divergenţa

$$\frac{\partial}{\partial x_m}(x_j x_l\,\sigma_{km}) = \frac{\partial x_j}{\partial x_m}x_l\,\sigma_{km} + x_j\frac{\partial x_l}{\partial x_m}\sigma_{km} + x_j x_l\frac{\partial \sigma_{km}}{\partial x_m}.$$

Raţionînd ca în cazul precedent, vom găsi că

$$\frac{\partial}{\partial x_m}(x_j\,x_l\,\sigma_{km}) = x_l\,\sigma_{kj} + x_j\,\sigma_{kl}.$$

Observăm acum că

$$\delta_{ijk}\frac{\partial}{\partial x_m}(x_j\,x_l\,\sigma_{km}) = \delta_{ijk}\,x_j\,\sigma_{kl},$$

deoarece $\delta_{ijk}\sigma_{kj} = 0$, ca urmare a faptului că tensorul tensiunilor este simetric. Aceasta ne permite să exprimăm prin integrala de suprafaţă şi valoarea medie a momentului tensorului tensiunilor

$$\langle\delta_{ijk}\,x_j\,\sigma_{kl}\rangle = \frac{1}{V}\oint_S \delta_{ijk}\,x_j\,P_k\,x_l\,\mathrm{d}S,$$

$$\langle\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma}\rangle = \frac{1}{V}\oint_S \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{P}\boldsymbol{r}\,\mathrm{d}S. \qquad (50.16)$$

Prin urmare, valoarea medie a tensorului tensiunilor şi a momentului său se pot determina din sarcinile de suprafaţă, fără a rezolva ecuaţiile teoriei elasticităţii. Rezultatul obţinut este important mai ales în cazurile în care suprafaţa corpului este liberă de sarcini. În acest caz cîmpul tensorului tensiunilor este autoechilibrat : tensorul însuşi poate fi diferit de zero, însă valoarea medie a lui şi momentul său trebuie să fie egale cu zero. De aici rezultă, în particular, că dacă o componentă oarecare a tensorului (sau a momentului lui) nu este identic nulă, ea va lua în mod obligatoriu atît valori pozitive cît şi valori negative.

§ 51. LEGEA GENERALIZATĂ A LUI HOOKE

Să calculăm lucrul forţelor exterioare, $\boldsymbol{P}$, aplicate pe suprafaţa S a unui corp elastic, al cărui volum este V. Dacă sub acţiunea acestor forţe punctele suprafeţei suferă deplasări mici, $\delta\boldsymbol{u}$, atunci lucrul mecanic este

$$\delta\mathcal{A} = \oint_S \delta\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{P}\,\mathrm{d}S = \oint_S \delta u_i\, P_i\,\mathrm{d}S.$$

Deoarece $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{n}$ fiind vectorul unitar al normalei exterioare la suprafaţa S, rezultă că

$$\delta\mathcal{A} = \oint_S \delta\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S = \oint_S \delta u_i\,\sigma_{ij}\,n_j\,\mathrm{d}S.$$

Să transformăm, ca şi în § 50, integrala de suprafaţă într-o integrală de volum

$$\delta\mathcal{A} = \int_V \mathrm{div}\,(\delta\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\sigma})\mathrm{d}V = \int_V \frac{\partial}{\partial x_j}(\partial u_i\,\sigma_{ij})\,\mathrm{d}V.$$

Conform regulii de diferenţiere a produsului,

$$\delta\mathcal{A} = \int_V \frac{\partial\,\delta u_i}{\mathrm{d}x_j}\,\sigma_{ij}\,\mathrm{d}V + \int_V \delta u_i\,\frac{\partial\,\sigma_{ij}}{\partial x_j}\,\mathrm{d}V. \qquad (51.1)$$

Derivatele în raport cu spaţiul ale micilor deplasări, $\partial(\delta u_i)/\partial x_j$, sînt egale cu micile distorsiuni, $\delta\varepsilon_{ij} + \delta\omega_{ij}$, însă deoarece contracţia tensorului antisimetric, $\delta\omega_{ij}$, cu tensorul simetric, σ_{ij}, este identic nulă, prima expresie de sub integrala (51.1) se reduce la $\sigma_{ij}\,\delta\varepsilon_{ij}$.

Să trecem la cea de a doua integrală. Conform ecuaţiilor elastodinamicii,

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho \ddot{u}_i,$$

iar δu_i poate fi luat drept $\dot{u}_i \delta t$, δt fiind intervalul de timp în care se produce deplasarea $\delta \boldsymbol{u}$. Mai departe,

$$\rho \ddot{u}_i u_i \delta t = \frac{1}{2} \rho \frac{\partial}{\partial t} (\dot{u}_i \dot{u}_i) \delta t,$$

dar aceasta nu este altceva decît variaţia energiei cinetice a unităţii de volum în timpul δt (în aproximaţia teoriei micilor deformări în procesul deformării densitatea ρ rămîne constantă). Prin urmare, cea de a doua integrală din (51.1) reprezintă, de fapt, variaţia energiei cinetice totale, $\mathcal{K}$, a corpului elastic. Prin urmare, lucrul mecanic al forţelor exterioare este

$$\delta \mathcal{A} = \int_V \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} \, \mathrm{d}V + \delta \mathcal{K},$$

astfel încît acea parte din lucrul mecanic consumat, care este cheltuită pentru a produce deformarea mică, $\delta \varepsilon_{ij}$, a unităţii de volum a corpului (sau, mai general, pentru a modifica deformarea unităţii de volum cu o cantitate mică $\delta \varepsilon_{ij}$), este egală cu

$$\delta R = \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}. \tag{51.2}$$

Corpurile elastice (mai exact, liniar-elastice) se caracterizează prin faptul că tensiunile din ele sînt proporţionale cu deformările. În cazul cristalelor, aceasta înseamnă că tensorul tensiunilor depinde liniar de tensorul deformărilor, această dependenţă liniară

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{c} : \boldsymbol{\varepsilon}, \tag{51.3}$$

fiind determinată de tensorul de material, $\boldsymbol{c}$; acesta se numeşte *tensorul coeficienţilor de elasticitate* sau *tensorul coeficienţilor de rigiditate* şi se exprimă în dyn/cm^2, kgf/cm^2 sau N/m^2.

Pentru a calcula lucrul mecanic necesar pentru o variaţie finită a deformării unităţii de volum a unui corp elastic anizotrop, de la valoarea $\varepsilon^{(0)}$ pînă la valoarea sa $\varepsilon^{(1)}$, trebuie integrată expresia (51.2) ţinînd cont de (51.3)

$$R = \int_{\varepsilon^{(0)}}^{\varepsilon^{(1)}} c_{ijkl} \varepsilon_{kl} \, \mathrm{d}\varepsilon_{ij}.$$

Această integrală depinde, în general, de drumul de integrare; o condiţie ca integrala să nu depindă totuşi de drumul de integrare este existenţa unei funcţii $W(\boldsymbol{\varepsilon})$, astfel încît

$$\mathbf{c}:\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \qquad c_{ijkl}\,\varepsilon_{kl} = \frac{\partial W}{\partial \varepsilon_{ij}}. \tag{51.4}$$

Atunci lucrul deformării elastice a unităţii de volum va fi egal cu

$$R = \int_{\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}}^{\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}} c_{ijkl}\,\varepsilon_{kl}\,\mathrm{d}\varepsilon_{ij} = W(\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}) - W(\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}),$$

astfel încît funcţia $W(\boldsymbol{\varepsilon})$ va reprezenta densitatea de energie a deformării elastice. În ipoteza cea mai firească, $W(0) = 0$, ea va fi egală cu

$$W = \frac{1}{2}\,c_{ijkl}\,\varepsilon_{ij}\,\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2}\,\boldsymbol{\varepsilon}:\mathbf{c}:\boldsymbol{\varepsilon}. \tag{51.5}$$

Din (51.4) mai rezultă, de asemenea, că

$$c_{ijkl} = \frac{\partial^2 W}{\partial \varepsilon_{ij}\,\partial \varepsilon_{kl}}, \qquad \mathbf{c} = \frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}\,\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \tag{51.6}$$

ceea ce înseamnă că $c_{ijkl} = c_{klij}$. Ţinînd cont şi de simetria internă $[V^2]$, a tensorului $\boldsymbol{\varepsilon}$ $(\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji})$, obţinem de aici că dacă relaţia (51.4) este satisfăcută, atunci simetria internă a tensorului $\mathbf{c}$ este egală cu $[[V^2]^2]$:

$$c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{klij}. \tag{51.7}$$

Relaţia (51.4), aşa cum rezultă însă din capitolul 7, este adevărată, în particular, în cazurile deosebit de importante cum ar fi deformarea adiabatică şi deformarea izotermă a cristalului.

În formulele (51.3), (51.5) şi (51.6) este comod să se înlocuiască perechile de indici ij şi kl cu indicii λ şi μ, care iau valorile $1,\ldots,6$. Metoda trecerii la o asemenea formă de scriere este expusă în anexa F. După aceasta, formulele vor căpăta, respectiv, forma

$$\sigma_\lambda = c_{\lambda\mu}\,\varepsilon_\mu, \tag{51.3'}$$

$$W = \frac{1}{2}\,c_{\lambda\mu}\,\varepsilon_\lambda\,\varepsilon_\mu, \tag{51.5'}$$

$$c_{\lambda\mu} = \frac{\partial^2 W}{\partial \varepsilon_\lambda\,\partial \varepsilon_\mu}. \tag{51.6'}$$

Relaţia (51.3) poate fi transformată, exprimînd deformările în funcţie de tensiuni

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}, \quad \varepsilon_{\lambda} = s_{\lambda\mu}\sigma_{\mu}, \tag{51.8}$$

s fiind *tensorul coeficienţilor deformabilităţii elastice*; simetria lui internă, aceeaşi, evident, ca şi a tensorului **c**, se exprimă în cm^2/dyn, cm^2/kgf sau m^2/N.

Relaţiile (51.3) şi (51.8) poartă numele de *legea generalizată a lui Hooke pentru mediile anizotrope*. Dacă este necesar să se ţină cont şi de dilatarea termică a cristalului, relaţiile se completează cu termeni care depind de temperatură.

În cazul unei variaţii uniforme cu Θ grade a temperaturii, cristalul, fără a fi supus unor solicitări exterioare, suferă o deformare termică

$$\varepsilon_{ij} = \alpha_{ij}\,\Theta, \qquad \varepsilon_{\lambda} = \alpha_{\lambda}\,\Theta,$$

$\boldsymbol{\alpha}$ fiind denumit *tensorul coeficienţilor de dilatare termică*; evident, ca şi tensorul $\boldsymbol{\varepsilon}$, el este simetric; dimensiunea lui este $grad^{-1}$.

În cazul general, cînd cristalul este supus atît tensiunilor mecanice cît şi variaţiei de temperatură, tensorul micilor deformări este format din componente determinate de fiecare dintre aceste acţiuni, separat,

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\ \sigma_{kl} + \alpha_{ij}\,\Theta, \quad \varepsilon_{\lambda} = s_{\lambda\mu}\ \sigma_{\mu} + \alpha_{\mu}\,\Theta. \tag{51.9}$$

Atunci termenii de origine termică apar şi în expresiile pentru tensiuni

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\,\varepsilon_{kl} - \beta_{ij}\,\Theta, \ \sigma_{\lambda} = c_{\lambda\mu}\ \varepsilon_{\mu} - \beta_{\lambda}\,\Theta; \tag{51.10}$$

$\boldsymbol{\beta}$ se numeşte *tensorul coeficienţilor termoelasticităţii*; ca şi $\boldsymbol{\alpha}$ el este tot simetric.

Să deducem relaţia dintre tensorii de material, care intră în legea generalizată a lui Hooke, şi termenii care apar datorită temperaturii, (51.9) şi (51.10). Înlocuind în formula (51.10) deformările, exprimate prin intermediul formulei (51.9), obţinem

$$\sigma_{\lambda} = c_{\lambda\mu}\ s_{\mu\nu}\ \sigma_{\nu} - (\beta_{\lambda} - c_{\lambda\mu}\ \alpha_{\mu})\,\Theta.$$

Deoarece această identitate trebuie să fie satisfăcută pentru orice valori ale tensiunilor, σ_{λ}, şi ale temperaturilor, Θ, din ea rezultă direct relaţiile căutate

$$c_{\lambda\mu}\ s_{\mu\nu} = \delta_{\lambda\nu}, \quad c_{ijkl}\ s_{klmn} = \frac{1}{2}\ (\delta_{im}\ \delta_{jn} + \delta_{in}\ \delta_{jm}), \tag{51.11}$$

$$\beta_{\lambda} = c_{\lambda\mu}\ \alpha_{\mu}, \qquad \beta_{ij} = c_{ijkl}\ \alpha_{kl}. \tag{51.12}$$

În cadrul expresiilor matematice ale legii Hooke, (51.3) și (51.10) (dar nu (51.8) și (51.9)!) tensorul deformărilor poate fi înlocuit prin tensorul distorsiunilor, $\partial \boldsymbol{u}/\partial \boldsymbol{r}$, sau cu tensorul transpus al acestuia, Grad $\boldsymbol{u}$ (vezi § 49). Este vorba aici despre faptul că

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{r}} - \boldsymbol{\omega} = \mathrm{Grad}\ \boldsymbol{n} + \boldsymbol{\omega},$$

iar tensorul micilor rotații, $\boldsymbol{\omega}$, fiind antisimetric, prin contracția după ultima pereche de indici cu tensorul simetric $\mathbf{c}$ dă zero

$$c_{ijkl}\, \omega_{kl} = 0, \quad \mathbf{c} : \boldsymbol{\omega} = 0.$$

Deci, legea Hooke, (51.3), poate fi scrisă sub forma

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c} : \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{r}} = \mathbf{c} : \mathrm{Grad}\ \boldsymbol{u}. \tag{51.13}$$

Substituind aceste expresii în (50.7), obținem ecuațiile de mișcare ale corpului elastic (ecuațiile *elastodinamicii*)

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j\, \partial x_l} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, \quad \mathbf{c} \vdots \mathrm{Grad\ Grad}\ \boldsymbol{u} = \rho \frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial t^2}, \tag{51.14}$$

și substituindu-le în (50.8), obținem ecuațiile echilibrului elastic (ecuațiile *elastostaticii*)

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j\, \partial x_l} = 0, \quad \mathbf{c} \vdots \mathrm{Grad\ Grad}\ \boldsymbol{u} = 0. \tag{51.15}$$

Acesta este un sistem de trei ecuații diferențiale, liniare, cu derivate parțiale, de ordinul doi, cu trei necunoscute. El este adecvat pentru rezolvarea problemelor de teoria elasticității în acele cazuri în care condițiile la limită sînt date pentru deplasări. De cele mai multe ori însă condițiile la limită sînt date pentru tensiuni, adică se dau forțele aplicate suprafeței cristalului. Subliniem faptul că condițiile la limită pe porțiunile din suprafața cristalului ce nu sînt supuse solicitărilor se dau anume pentru tensiuni: cu toate că forțele aplicate acestor părți ale suprafeței sînt egale cu zero, deplasările sînt însă aici, în general vorbind, diferite de zero.

În cazul în care sînt date condiţiile la limită pentru tensiuni, este mai comod să se scrie ecuaţiile diferenţiale ale teoriei elasticităţii într-o formă în care funcţiile necunoscute să fie componente ale tensiunilor $\boldsymbol{\sigma}$. După cum ştim, ele trebuie să satisfacă ecuaţiile echilibrului elastic ale lui Cauchy, (50.8), pe cînd componentele tensorului de deformare, $\boldsymbol{\varepsilon}$, obţinute din ele aplicînd legea Hooke satisfac ecuaţiile de compatibilitate Saint-Venant, (49.18). Astfel, se ajunge la un sistem de nouă ecuaţii diferenţiale în cele şase funcţii necunoscute, $\sigma_{ij}(\boldsymbol{r})$ (ecuaţiile (51.17) se numesc ecuaţiile Beltrami-Mitchell extinse pentru cazul corpului anizotrop)

$$\operatorname{Div} \boldsymbol{\sigma} = 0, \qquad \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0, \tag{51.16}$$

$$\operatorname{Ink} (\mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}) = 0, \qquad \delta_{ikn}\, \delta_{jlm}\, s_{mnpq} \frac{\partial^2 \sigma_{pq}}{\partial x_k\, \partial x_l} = 0, \tag{51.17}$$

cu trei condiţii la limită

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{P}, \qquad \sigma_{ij}\, n_j = P_i, \tag{51.18}$$

unde $\boldsymbol{P}$ este o funcţie vectorială de coordonate, dată pe întreaga suprafaţă a corpului elastic. Se poate demonstra (v. Leibenzon, 1947, § 118, şi Novojilov, 1958, cap. V, § 18) că acest sistem are întotdeauna soluţie, fiind totodată unică.

Legea lui Hooke este scrisă fără termenii care depind de temperatură; rezultă deci că ecuaţiile reduse exprimă echilibrul elastic al unui cristal, cînd temperatura este constantă. Calculul dilatării termice a unui cristal şi tensiunile datorate temperaturii, legate de dilatare, le rezervăm pentru § 55.

Pentru rezolvarea ecuaţiilor teoriei elasticităţii în tensiuni, pentru cazurile mai complicate, se utilizează, de obicei, tensorul funcţiilor tensiunilor, $\boldsymbol{\Phi}$. Acesta este un tensor simetric de rangul doi, legat de tensorul tensiunilor, $\boldsymbol{\sigma}$, prin relaţia

$$\boldsymbol{\sigma} = \operatorname{Ink} \boldsymbol{\Phi}.$$

Se poate verifica uşor că

$$\operatorname{Div} \operatorname{Ink} = 0,$$

astfel încît ecuaţiile echilibrului elastic ale lui Cauchy sînt satisfăcute identic, pentru determinarea lui $\boldsymbol{\Phi}$ fiind suficient să se rezolve sistemul de ecuaţii

$$\operatorname{Ink} (\mathbf{s} : \operatorname{Ink} \boldsymbol{\Phi}) = 0,$$

cu condiţiile la limită

$$\boldsymbol{n} \cdot \operatorname{Ink} \boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{P}.$$

Tensorul funcţiilor tensiunilor nu este univoc determinat în acest caz, ci numai cu o exactitate de pînă la un termen de forma Def v, v fiind un vector arbitrar. Această neunivocitate este totuşi complet neesenţială, pentru că din ecuaţiile de compatibilitate ale lui Saint-Venant rezultă că

$$\text{Ink Def} = 0.$$

Prin urmare, tensorul tensiunilor, σ, este determinat, în ultimă instanţă, complet univoc. Amănunte în legătură cu aceasta sînt în lucrările lui Lure (1955, cap. I, § 5) şi Krutkov (1949). În general pentru rezolvarea problemelor de teorie a elasticităţii anizotrope, pot fi consultate lucrările lui Lehniţki (1947, 1950, 1971) şi Ambarţumean (1967). Menţionăm în mod special problema construirii tensorului Green pentru sistemul de ecuaţii ale elastostaticii cristalelor, (51.15) — pentru aceasta se mai poate consulta lucrarea lui Lifşiţ şi Rozenţveig (1947).

§ 52. SIMETRIA PROPRIETĂŢILOR ELASTICE ALE CRISTALELOR

În § 51 au fost deduşi tensorii de material **s**, **c**, $\boldsymbol{\alpha}$ şi $\boldsymbol{\beta}$, care caracterizează proprietăţile elastice, dilatarea termică şi termoelasticitatea cristalelor. Tensorii $\boldsymbol{\alpha}$ şi $\boldsymbol{\beta}$ sînt tensori simetrici de rangul doi; influenţa simetriei cristalelor asupra proprietăţilor descrise de aceşti tensori a fost studiată amănunţit în capitolul 3. În figurile 24.1, 24.2 şi 24.3 sînt prezentate suprafeţele dilatării termice ale unor cristale. Spre deosebire de tensorii permitivităţii dielectrice, conductibilităţii termice şi conductibilităţii electrice, tensorul dilatării termice poate avea şi valori proprii negative.

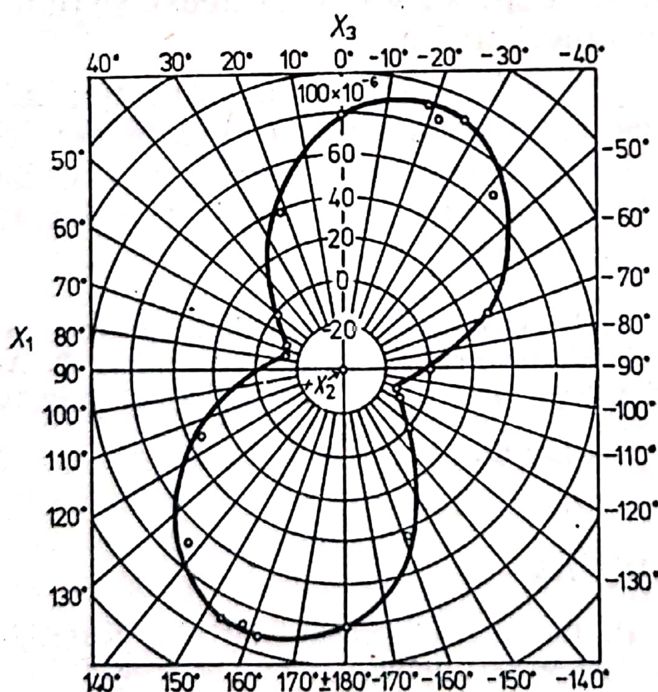


Fig. 52.1. Dilatarea termică a unui cristal de etilendiamintartrat, clasa 2, în planul X_1X_2 (aceasta nu este o secţiune a suprafeţei) (Mason, 1952).

Din această cauză, suprafeţele dilatării termice ale unor cristale, de exemplu, calcit, etilendiamintartrat (de comparat figurile 24.3 şi 52.1) sînt alb-negre (în acestă figură şi în următoarele

porțiunile pozitive „negre" și negative „albe" ale suprafețelor sînt însemnate respectiv cu semnele plus și minus), ceea ce nu s-a întîmplat niciodată în cazul suprafețelor tensorilor de material studiați mai înainte. Porțiunile negre ale unei suprafețe corespund acelor direcții din cristal, după care dimensiunile liniare în loc să crească odată cu creșterea temperaturii, ca de obicei, se micșorează. Conul direcțiilor în care dilatarea termică este egală cu zero este determinat din ecuația $\alpha_{ij} q_i q_j = 0$, în componentele vectorului unitar, $\boldsymbol{q}$. De exemplu, în cazul calcitului, acest vector face un unghi de 64°43′ cu axa principală de simetrie, X_3. Geometria dilatării termice a cristalelor a fost studiată amănunțit de către A. V. Șubnikov (1956).

Forma generală a tensorilor coeficienților elasticității și deformabilității elastice, invarianți la toate grupurile posibile cristalografice și limită, este dată în tabelul E 18. Faptul însă că forma generală a acestor tensori în unele clase este diferită, nu implică nicidecum că și simetria proprietăților elastice a cristalelor respective este tot diferită. Astfel, din tabelele E 18 și 47.1 se vede că numărul de invarianți independenți ai tensorului proprietăților elastice este același pentru ambele subsisteme ale sistemului tetragonal. Numărul diferit de componente cît și forma diferită a tensorilor din subsistemele superior și inferior se poate explica simplu prin faptul că direcțiile vectorilor bazei, $\boldsymbol{e}_1$ și $\boldsymbol{e}_2$, din subsistemele inferioare ale categoriei medii nu sînt determinate de elementele de simetrie ale cristalului. De aceea, pentru subsistemul inferior vom introduce, pe lîngă baza cristalofizică, $\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$, baza

$$\begin{aligned} \boldsymbol{e}_1' &= \boldsymbol{e}_1 \cos\varphi + \boldsymbol{e}_2 \sin\varphi, \\ \boldsymbol{e}_2' &= -\boldsymbol{e}_1 \sin\varphi + \boldsymbol{e}_2 \cos\varphi, \\ \boldsymbol{e}_3' &= \boldsymbol{e}_3, \end{aligned} \qquad (52.1)$$

luînd unghiul φ astfel încît componenta s_{16}' a tensorului $s_{\lambda\mu}$ în această bază să fie egală cu zero

$$s_{16}' = P_{1'\lambda} P_{6'\mu} s_{\lambda\mu} = 0. \qquad (52.2)$$

Substituind în ecuația (52.2) elementele matricei $P_{x'\lambda}$, care definește rotația în jurul axei X_3 (vezi formula (F.26)), și componentele tensorului pentru subsistemul inferior al sistemului tetragonal (v. tabelul E. 18), obținem

$$\operatorname{tg} 4\varphi = \frac{4 s_{16}}{2(s_{11} - s_{12}) - s_{66}}. \qquad (52.3)$$

Unghiul φ poate fi determinat din condiţia ca componentele c'_{16} ale tensorului $c_{\lambda\mu}$ să fie zero. Astfel obţinem

$$\mathrm{tg}\, 4\varphi = \frac{4c_{16}}{c_{11} - c_{12} - 2c_{66}}. \tag{52.4}$$

Aşadar, în baza (52.1) în care unghiul φ este determinat din condiţia (52.3) sau (52.4), tensorii **s** şi **c** pentru un sistem inferior al sistemului tetragonal capătă aceeaşi formă pe care o au în baza cristalofizică aceşti tensori, pentru subsistemul superior al aceluiaşi sistem. De aici rezultă că toate cristalele sistemului tetragonal fac parte dintr-o singură clasă de simetrie elastică, $4/mmm$. Figurile 54.3 — 54.5 arată că suprafeţele proprietăţilor elastice pentru cristalele ambelor subsisteme ale sistemului tetragonal au într-adevăr aceeaşi simetrie, $4/mmm$.

Ambele subsisteme ale sistemului tetragonal formează, de asemenea, o singură clasă de simetrie elastică, $\bar{3}m$. Baza (52.1) pentru subsistemul inferior al sistemului trigonal se determină din condiţia

$$\mathrm{tg}\, 3\varphi = \frac{s_{25}}{s_{14}} = \frac{c_{25}}{c_{14}}. \tag{52.5}$$

Cu toate că forma generală a tensorilor proprietăţilor elastice a fost stabilită încă din secolul al XIX-lea, faptul că clasele simetriei elastice $\bar{3}m$ şi $4/mmm$ coincid cu sistemele trigonal şi tetragonal a fost observat relativ recent.

Ca orice alţi tensori, şi tensorii **c** şi **s** pot fi descompuşi (v., de exemplu, § 83), în părţi ireductibile. Aceste părţi ireductibile se exprimă prin tensorii ireductibili, introduşi în § 47 cu ajutorul tensorilor izotropi ai lui Kronecker şi Levi-Civita. Vom efectua descompunerea tensorilor **c** şi **s** în două etape. În prima etapă separăm din aceştia părţile $\mathbf{c}^{\{4\}}$ şi $\mathbf{s}^{\{4\}}$, simetrice în raport cu toţi indicii; părţile rămase, $\mathbf{c}^{\{22\}}$ şi $\mathbf{s}^{\{22\}}$, care au simetria internă $[[V^2]^2]$, se anulează prin simetrizare în raport cu toţi indicii. Aşadar, prima etapă a dezvoltării este

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}^{\{4\}} + \mathbf{s}^{\{22\}}, \quad s^{\{4\}}_{ijkl} = s_{(ijkl)}, \quad s^{\{22\}}_{ijkl} = s_{ijkl} - s_{(ijkl)} \tag{52.6}$$

(formulele pentru **c** sînt complet analoage). Utilizînd metodele teoriei şi reprezentărilor grupurilor, se poate arăta că $\mathbf{s}^{\{4\}}$ se descompune în trei părţi — scalară, deviatoare şi nonoară — iar $\mathbf{s}^{\{22\}}$ în două părţi — scalară şi deviatoare. Simetria internă a tensorilor

$s^{\{4\}}$ şi $s^{\{22\}}$ determină univoc (cu exactitate de pînă la nişte coeficienţi numerici) forma descompunerilor din etapa a doua*

$$s^{\{4\}}_{ijkl} = I^{\{4\}}\,\delta_{(ij}\,\delta_{kl)} + D^{\{4\}}_{(ij}\,\delta_{kl)} + N^{\{4\}}_{ijkl}, \tag{52.7}$$

$$s^{\{22\}}_{ijkl} = I^{\{22\}}(\delta_{ij}\,\delta_{kl} - \delta_{(ij}\,\delta_{kl)}) + \left[\frac{1}{2}(D^{\{22\}}_{ij}\,\delta_{kl} + D^{\{22\}}_{kl}\,\delta_{ij}) - D^{\{22\}}_{(ij}\,\delta_{kl)}\right] \tag{52.8}$$

Contractînd membrii din dreapta şi din stînga ai acestor egalităţi, sînt uşor de găsit formulele ce exprimă tensorii ireductibili $I^{\{4\}}$, $\mathbf{D}^{\{4\}}, \ldots, \mathbf{D}^{\{22\}}$ prin tensorii $\mathbf{s}^{\{4\}}$ şi $\mathbf{s}^{\{22\}}$

$$I^{\{4\}} = \frac{1}{5}\,s^{\{4\}}_{iikk}, \quad D^{\{4\}}_{ij} = \frac{2}{7}(3s^{\{4\}}_{ijkk} - 5I^{\{4\}}\,\delta_{ij}),$$

$$N^{\{4\}}_{ijkl} = s^{\{4\}}_{ijkl} - I^{\{4\}}\,\delta_{(ij}\,\delta_{kl)} - D^{\{4\}}_{(ij}\,\delta_{kl)},$$

$$I^{\{22\}} = \frac{1}{4}\,s^{\{22\}}_{iikk}, \quad D^{\{22\}}_{ij} = 3s^{\{22\}}_{ijkk} - 4I^{\{22\}}\,\delta_{ij}.$$

Pentru cristalele claselor pentru care deviatorii şi nonorii ireductibili sînt multipli ai unităţii, adică

$$D^{\{4\}}_{ij} = S^{\{4\}}_{D}\,D^{(0)}_{ij}, \quad D^{\{22\}}_{ij} = S'^{\{22\}}_{D}\,D^{(0)}_{ij} \quad \text{ş.a.m.d.}$$

(v. tabelul 47.4), aceste dezvoltări se simplifică substanţial, căpătînd forma

$$s_{ijkl} = S^{\{4\}}_{I}\,\delta_{(ij}\,\delta_{kl)} + S^{\{4\}}_{D}\,D^{0}_{(ij}\,\delta_{kl)} + S^{\{4\}}_{N}N^{0}_{ijkl} + S^{\{22\}}_{I}(\delta_{ij}\delta_{kl} - \delta_{(ij}\delta_{kl)}) +$$

$$+ S^{\{22\}}_{D}\left[\frac{1}{2}(D^{0}_{ij}\,\delta_{kl} + D^{0}_{kl}\,\delta_{ij}) - D_{(ij}\,\delta_{kl)}\right] = \frac{1}{3}(S^{\{4\}}_{j} + 2S^{\{22\}}_{I})\delta_{ij}\,\delta_{kl} +$$

---

* Prima etapă constă în descompunerea tensorilor **c** şi **s** în părţi care se transformă după reprezentările ireductibile ale grupurilor tuturor transformărilor liniare posibile ale spaţiului tridimensional $GL(3)$, $\{4\}$ şi $\{22\}$, fiind notaţiile reprezentărilor ireductibile corespunzătoare. În a doua etapă fiecare dintre ele se descompune în părţi care se transformă după reprezentările ireductibile D_l ale grupului ortogonal $\infty\infty m$ sau $O(3)$ — ele se şi numesc aici părţi ireductibile. Amănunte asupra acestor probleme se pot vedea în Sirotin (1974); tot acolo sînt date formulele de descompunere în părţi ireductibile şi a celorlalţi tensori de material.

$$+\frac{1}{3}(S_I^{\{4\}}-S_I^{\{22\}})(\delta_{ik}\,\delta_{jl}+\delta_{il}\,\delta_{jk})+\frac{1}{6}(S_D^{\{4\}}+2S_D^{\{22\}})(D_{ij}^0\,\delta_{kl}+$$

$$+D_{kl}^0\,\delta_{ij})+\frac{1}{6}(S_D^{\{4\}}-S_D^{\{22\}})(D_{ik}^0\,\delta_{jl}+D_{jl}^0\,\delta_{ik}+D_{il}^0\,\delta_{jk}+$$

$$+D_{jk}^0\,\delta_{il})+S_N^{\{4\}}N_{ijkl}^0. \qquad (52.9)$$

Aici coeficienţii $S_I^{\{4\}}\equiv I^{\{4\}}$ şi $S_I^{\{22\}}\equiv I^{\{22\}}$ sînt introduşi pentru uniformizarea scrierii. Dezvoltările (52.7) şi (52.8) s-au contopit, dar cu ajutorul indicilor $\{4\}$ şi $\{22\}$ ai coeficienţilor S se pot separa uşor.

Conform teoremei lui Hermann, cristalele din sistemul hexagonal sînt transversal izotrope în ce priveşte proprietăţile lor elastice, formînd, împreună cu texturile, clasa de simetrie elastică ∞/mm. Toate direcţiile care fac cu axa principală de simetrie acelaşi unghi sînt asemănătoare din punct de vedere al proprietăţilor elastice, în ciuda faptului că, în cazul cristalelor hexagonale, aceste direcţii sînt, desigur, cristalografic deosebite. Acesta este unul dintre numeroasele cazuri în care simetria unei proprietăţi a cristalului este superioară simetriei cristalului însuşi.

Pentru cristalele sistemului hexagonal şi pentru texturi, deviatorii şi nonorii sînt multipli ai unităţii, deviatorul unitar şi, respectiv, nonorul unitar fiind definiţi prin formulele

$$D_{ij}^0=\frac{1}{2}(3\,k_i\,k_j-\delta_{ij}), \qquad (52.10)$$

$$N_{ijlm}^0=\frac{1}{8}(35\,k_i\,k_j\,k_l\,k_m-30\,k_{(i}\,k_j\,\delta_{lm)}+3\delta_{(ij}\,\delta_{lm)}), \qquad (52.11)$$

unde $\boldsymbol{k}$ este vectorul unitar al axei principale de simetrie; în sistemul de coordonate cristalofizic $k_i=\delta_{i3}$, formulele (52.10) şi (52.11) trecînd în formulele pentru $\mathbf{D}^0[\infty/mm]$ şi $\mathbf{N}^0[\infty/mm]$ din tabelul 47.4. Pentru aceste cristale, coeficienţii dezvoltării (52.9) sînt egali cu

$$S_I^{\{4\}}=\frac{1}{15}(8\,s_{11}+3s_{33}+4s_{13}+2s_{44}),$$

$$S_I^{\{22\}}=\frac{1}{6}(-s_{11}+3s_{12}+4s_{13}-s_{44}),$$

$$S_D^{\{4\}} = \frac{2}{21} (-8\, s_{11} + 6s_{33} + 2s_{13} + s_{44}), \qquad (52.12)$$

$$S_D^{\{22\}} = \frac{1}{3} (2s_{11} - 6s_{12} + 4s_{13} - s_{44}),$$

$$S_N^{\{4\}} = \frac{8}{35} (s_{11} + s_{33} - 2s_{13} - s_{44}).$$

Tensorul **c** se descompune prin acelaşi procedeu. În formula (52.9) cînd este aplicată tensorului **c**, este firesc ca coeficienţii să se scrie sub forma $C_I^{\{4\}}, \ldots, C_D^{\{22\}}$. Aceşti coeficienţi se calculează după formulele (52.12), în care, $s_{11}, \ldots, s_{13}$ sînt înlocuiţi prin $c_{11}, \ldots, c_{13}$, pe cînd în locul lui s_{44} urmează să se pună $4c_{44}$.

Dacă coeficienţii $C_D^{\{4\}}$, $C_D^{\{22\}}$ şi $C_N^{\{4\}}$ sau $S_D^{\{4\}}$, $S_D^{\{22\}}$ şi $S_N^{\{4\}}$ ar fi egali cu zero, tensorul coeficienţilor de elasticitate şi cel al coeficienţilor deformabilităţii elastice ar deveni tensori izotropi. De aici rezultă deci că aceste seturi de coeficienţi caracterizează anizotropia corpurilor transversal-izotrope în ceea ce priveşte proprietăţile elastice. Se poate verifica suficient de uşor că anularea tuturor coeficienţilor unuia dintre seturi implică şi anularea tuturor coeficienţilor celuilalt set. Totodată, coeficienţii $C_I^{\{22\}}$ şi $C_D^{\{22\}}$ şi, respectiv, $S_I^{\{22\}}$ şi $S_D^{\{22\}}$, caracterizează antisimetria tensorilor **c** şi **s** faţă de indici : dacă ei ar deveni egali cu zero, simetria internă a tensorilor **c** şi **s** ar fi $[V^4]$.

Cristalele sistemului cubic se deosebesc de corpurile izotrope după simetria proprietăţilor elastice, constituind clasa de simetrie $m3m$. Nonorii lor sînt multipli ai unităţii, iar deviatorii sînt egali cu zero (vezi tabelul 47.1). Din această cauză, descompunerea (52.9) pentru cristalele cubice se mai simplifică încă, căpătînd forma

$$s_{ijkl} = S_I^{\{4\}}\, \delta_{(ij}\, \delta_{kl)} + S_N^{\{4\}}\, N^0_{ijkl} + S_I^{\{22\}}\, (\delta_{ij}\, \delta_{kl} - \delta_{(ij}\, \delta_{kl)}) =$$

$$= \frac{1}{3} (S_I^{\{4\}} + 2S_I^{\{22\}})\, \delta_{ij}\, \delta_{kl} + \frac{1}{3} (S_I^{\{4\}} - S_I^{\{22\}})\, (\delta_{ik}\, \delta_{lj} +$$

$$+ \delta_{il}\, \delta_{jk}) + S_N^{\{4\}}\, N^0_{ijkl}. \qquad (52.13)$$

Nonorul unitar al simetriei cubice (pe el urmează să-l notăm $\mathbf{N}^0[m3m]$, pentru a se deosebi de $\mathbf{N}^0[\infty/mm]$, introdus mai sus),

în concordanță cu § 47, are, într-un reper cristalofizic, componentele

$$N^0_{ijkl} = \begin{cases} 1 \text{ pentru cei patru indici egali}, \\ -1/2 \text{ pentru două perechi de indici egali}, \\ 0 \text{ în celelalte cazuri}. \end{cases} \qquad (52.14)$$

Coeficienții descompunerii (52.13) se calculează după formulele

$$S_I^{\{4\}} = \frac{1}{5}(3s_{11} + 2s_{12} + s_{44}),$$

$$S_I^{\{22\}} = s_{12} - \frac{1}{4} s_{44}, \qquad (52.15)$$

$$S_N^{\{4\}} = \frac{1}{5}(2s_{11} - 2s_{12} - s_{44}).$$

Tensorul coeficienților elasticității se determină și ei tot cu formula (52.13), în care locul coeficieților S îl iau coeficienții C; aceștia, la rîndul lor, se calculează după formulele (52.15), în care, în loc de s_{11}, s_{12} și s_{44} se pun, respectiv, c_{11}, c_{12} și $4c_{44}$.

Faptul că tensorii **c** și **s** sînt antisimetrici în raport cu indicii este caracterizat respectiv de coeficienții $C_I^{\{22\}}$ și $S_I^{\{22\}}$. Anizotropia elastică a cristalelor cubice este determinată de coeficienții $C_n^{\{4\}}$ și $S_N^{\{4\}}$, anularea unuia dintre ei implicînd și anularea celuilalt. Deoarece constantele elastice depind în mod substanțial de temperatură, și coeficienții anizotropiei elastice depind, de asemenea, de temperatură. Astfel, în cazul sării geme, pe măsură ce temperatura crește, anizotropia elastică se micșorează pînă la temperatura de 690 K, la care cristalul devine elastic izotrop, iar dacă temperatura crește în continuare, semnul anizotropiei (adică al coeficienților $C_N^{\{4\}}$ și $S_N^{\{4\}}$) se schimbă. Gradul de anizotropie elastică se evaluează prin raportul adimensional

$$A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}} = \frac{2(s_{11} - s_{12})}{s_{44}}, \qquad (52.16)$$

care exprimă dependența de direcție a rezistenței unui cristal cubic la o deformație de forfecare (de comparat cu tabelul 53.3).

În cazul corpurilor izotrope și girotrope tensorii coeficienților de elasticitate și de deformabilitate elastică sînt izotropi

$$s_{ijkl} = S_I^{\{4\}} \delta_{(ij} \delta_{kl)} + S_I^{\{22\}} (\delta_{ij} \delta_{kl} - \delta_{(ij} \delta_{kl)}) =$$

$$= \frac{1}{3} (S_I^{\{4\}} + 2S_I^{\{22\}}) \delta_{ij} \delta_{kl} + \frac{1}{3} (S_I^{\{4\}} - S_I^{\{22\}}) \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}), \tag{52.17}$$

$$S_I^{\{4\}} = s_{11}, \quad S_I^{\{22\}} = \frac{1}{2} (s_{11} - 3s_{12}) ; \tag{52.18}$$

formule analoage sînt valabile pentru tensorul **c**. Pentru corpurile izotrope, din formula (51.11) rezultă relațiile

$$(c_{11} - c_{12}) (s_{11} - s_{12}) = (c_{11} + 2c_{12})(s_{11} + 2s_{12}) = c_{44}\, s_{44} = 1 \tag{52.19}$$

(formulele (52.19) sînt adevărate și pentru cristalele din sistemul cubic), iar din formula (52.16), relațiile

$$c_{11} - c_{12} = 2c_{44}, 2(s_{11} - s_{12}) = s_{44}. \tag{52.20}$$

Pentru caracterizarea proprietăților elastice ale corpurilor izotrope, alături de coeficienții de elasticitate și de deformabilitate elastică se mai utilizează și modulul lui Young,

$$E = \frac{1}{s_{11}},$$

coeficientul lui Poisson,

$$\nu = -\frac{s_{12}}{s_{11}},$$

modulul de comprimare în volum,

$$K = \frac{1}{3} (c_{11} + 2c_{12}),$$

modulul de forfecare,

$$G = \frac{(c_{11} - c_{12})}{2} = \frac{1}{s_{44}},$$

și coeficienții lui Lamé,

$$\lambda = c_{12} \text{ și } \mu = G.$$

Doi coeficienți independenți caracterizează proprietățile elastice ale unui material izotrop.

Proprietățile elastice ale unor cristale sînt date în tabelele 52.1 și 52.2. În general, relativ la proprietățile elastice ale cristalelor poate fi consultată lucrarea lui Aleksandrov și Rîjov (1961).

Tabelul 52.1

Coeficienții de elasticitate, $c_{\lambda\mu}$ (în 10^{11} dyn/cm²), și de deformabilitate elastică, $s_{\lambda\mu}$ (în 10^{-13} cm²/dyn), pentru unele cristale

Sistemul cubic

Cristalul	c_{11}	c_{12}	c_{44}	Cristalul	c_{11}	c_{12}	c_{44}
Diamant	107,6	12,5	57,6	LiF	11,12	4,20	6,28
Germaniu	12,89	4,83	6,71	NaCl	4,96	1,24	1,29
Siliciu	16,74	6,52	7,96	Ag	5,01	3,62	0,63
GaAs	11,88	5,38	5,94	Fier α	24,2	14,65	11,2
ZnS	10,79	7,22	4,12	Sodiu	0,603	0,459	0,586
KBr	3,45	0,54	0,51	Aluminiu	10,73	6,09	2,83
KI	2,71	0,45	0,36	Cupru	16,84	12,14	7,54
KCl	4,03	0,66	0,62	Wolfram	51,26	20,58	15,27

Sistemul hexagonal

Cristalul	c_{11}	c_{33}	c_{44}	c_{12}	c_{13}
CdS	8,16	8,08	1,43	4,95	4,79
Gheață (—16 °C)	1,385	1,449	0,319	0,707	0,581
Cuarț β (600 °C)	11,66	11,04	3,61	1,67	3,28
Magneziu	5,05	5,87	1,68	2,32	1,81
Zinc	15,9	6,21	4,00	3,23	4,82

Sistemul tetragonal

Cristalul	c_{11}	c_{33}	c_{44}	c_{66}	c_{12}	c_{13}
$BaTiO_3$	27,51	16,49	5,43	11,31	17,90	15,16
KH_2PO_4	7,16	5,64	1,25	0,62	—0,62	1,49
$NH_4H_2PO_4$	6,88	3,40	0,86	0,60	0,41	2,04
Rutil	27,3	48,4	12,5	19,4	17,6	14,9

Sistemul trigonal

Cristalul	c_{11}	c_{33}	c_{44}	c_{12}	c_{13}	c_{14}
Calcit	13,8	7,92	3,42	4,55	4,49	—2,07
Cuarț α	8,68	10,59	5,83	0,71	1,19	—1,81
Corindon	49,7	49,8	14,7	16,4	11,1	—2,4
Telur	3,59	7,64	3,41	0,90	2,75	1,37
Turmalină	27,2	16,5	6,5	4,0	3,5	—0,7

Tabelul 52.1 (continuare)

Sistemul rombic

Cristalul	c_{11}	c_{22}	c_{33}	c_{44}	c_{55}	c_{66}	c_{12}	c_{13}	c_{23}
Aragonit	16,0	8,67	8,45	4,14	2,56	4,27	3,73	0,17	1,57
Sare Seignette	2,80	4,14	3,94	0,67	0,28	0,96	1,74	1,50	1,97
HIO_3	2,99	5,39	4,35	1,84	2,19	1,74	1,11	1,15	0,51
Topaz	28,7	36,5	30,0	11,0	13,5	13,3	12,8	8,5	9,0
Uraniu α	21,5	19,9	26,7	12,4	7,3	7,4	4,6	2,2	10,8

Sistemul monoclinic

Cristalul	c_{11}	c_{22}	c_{33}	c_{12}	c_{13}	c_{23}	c_{44}
Sulfat triglicinic	4,55	3,21	2,63	1,72	1,98	2,08	0,95
Etilendiamintartrat	6,40	3,36	2,25	1,30	2,67	1,03	0,52

Cristalul	c_{55}	c_{66}	c_{15}	c_{25}	c_{35}	c_{46}
Sulfat triglicinic	1,11	0,62	−0,30	−0,036	−0,5	−0,026
Etilendiamintartrat	1,16	0,52	1,31	−0,008	0,73	−0,01

Sistemul cubic

Cristalul	s_{11}	s_{12}	s_{44}	Cristalul	s_{11}	s_{12}	s_{44}
Diamant	0,95	−0,1	1,74	NaCl	22,9	−4,6	79,4
GaAs	11,72	−3,65	16,83	$NaClO_3$	23,35	−5,15	85,4
ZnS	18,39	−7,07	21,69	Aluminiu	15,7	−5,7	35,1
KCl	26,2	−3,5	160,0	Sodiu	6,03	−4,59	5,86
LiF	11,35	−3,1	15,9	Cupru	14,98	−6,29	13,26

Sistemul hexagonal

Cristalul	s_{11}	s_{33}	s_{12}	s_{13}	s_{44}
Cuarț α	9,26	10,85	−0,80	−2,52	27,89
CdS	20,69	16,97	−9,99	−5,81	66,49

Sistemul trigonal

Cristalul	s_{11}	s_{33}	s_{12}	s_{13}	s_{44}	s_{14}
Cuarț α	12,79	9,56	−1,54	−1,10	19,78	4,46
Telur	56,1	23,8	−13,6	−14,4	52,9	26,9
Turmalină	3,98	6,24	− 1,03	−0,16	15,12	0,58

Tabelul 52.1 (continuare)

Sistemul tetragonal

Cristalul	s_{11}	s_{33}	s_{12}	s_{13}	s_{44}	s_{66}	s_{16}
$BaTiO_3$	8,05	15,7	−2,35	−5,24	18,4	8,84	
$NH_4H_2PO_4$	18,1	43,5	1,9	−11,8	115,3	164,6	
KH_2PO_4	15,3	19,6	2,0	− 3,8	77,5	168,0	
$AgClO_3$	35,7	40,0	−15,6	−12,9	152,0	114,0	9,4
$CaMoO_4$	9,74	9,58	−3,80	−2,30	27,2	24,7	4,33
Pentaeritrit	199,9	127,2	82,2	−17,7	285,7	219,1	9,94

Sistemul rombic

Cristalul	s_{11}	s_{22}	s_{33}	s_{12}	s_{13}	s_{23}	s_{44}	s_{55}	s_{66}
HIO_3	39,8	20,1	25,6	−7,75	−9,7	−0,45	54,5	45,6	57,6
$KB_5O_8\cdot 4H_2O$	23,2	73,6	98,3	−10,6	− 6,1	−60,0	64,0	215,0	175,0
Rezorcină	190,0	106,0	150,0	−40,0	−34,0	−88,0	307,0	230,0	250,0

Sistemul monoclinic

Cristalul	s_{11}	s_{22}	s_{33}	s_{12}	s_{13}	s_{23}	s_{44}
$Li_2SO_4\cdot H_2O$	26,2	22,5	23,9	−7,0	−9,8	− 3,0	38,4
Sulfat triglicinic	34,0	66,0	93,2	−3,4	−22,4	−48,2	105,1
Etilendiamintartrat	33,4	36,5	100,2	−3,0	−32,8	−18,0	191,8

Cristalul	s_{55}	s_{66}	s_{15}	s_{25}	s_{35}	s_{46}
$Li_2SO_4\cdot H_2O$	50,6	69,0	4,0	−7,3	−0,5	−8,8
Sulfat triglicinic	92,0	161,4	7,9	−0,9	−3,4	4,4
Etilendiamintartrat	122,0	191,4	−17,0	15,0	−26,5	3,8

Tabelul 52.2

Coeficienții de elasticitate $c_{\lambda\mu}$ (în 10^{10} N/m²), ai cristalului triclinic de sulfat de cupru, $CuSO_4\cdot 5H_2O$ (Krishnan, Radha, Gopal, 1971)

λ	μ					
	1	2	3	4	5	6
1	5,65	2,65	3,21	−0,33	−0,08	−0,39
2	2,65	4,33	3,47	−0,07	−0,21	0,20
3	3,21	3,47	5,69	−0,44	−0,21	−0,16
4	−0,33	−0,07	−0,44	1,73	0,09	0,03
5	−0,08	−0,21	−0,21	0,09	1,22	−0,26
6	−0,39	0,20	−0,16	0,03	−0,26	1,00

§ 53. STĂRILE TENSIONATE SIMPLE

Vom considera stări tensionate simple acele stări tensionate pentru care tensorul tensiunilor, **σ**, depinde liniar de coordonatele carteziene

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{A} + \mathbf{B}.r, \qquad \sigma_{ij} = A_{ij} + B_{ijk}x_k, \tag{53.1}$$

unde **A** și **B** sînt tensori care nu depind de coordonate: **A** este un tensor simetric de rangul doi, iar **B**, un tensor de rangul trei, simetric în raport cu primii doi indici. Este adevărată următoarea teoremă.

T e o r e m a   s t ă r i l o r   t e n s i o n a t e   s i m p l e . Dacă într-un corp izotrop, sub acțiunea unor forțe aplicate la suprafața sa, apare o anumită stare tensionată simplă, atunci, într-un corp anizotrop omogen, de aceeași formă, sub acțiunea acelorași forțe va apărea exact aceeași stare de tensiune.

Demonstrația se bazează pe teorema asupra unicității soluțiilor ecuațiilor din teoria elasticității. Într-adevăr, în ecuațiile Beltrami-Mitchell intră numai derivatele de ordinul doi ale tensorului tensiunilor, care, în cazul unei stări tensionate simple, sînt toate nule, astfel încît toate aceste ecuații sînt identic satisfăcute. În ecuațiile echilibrului elastic ale lui Cauchy, în general, nu intră nici un fel de caracteristici de material, astfel încît la înlocuirea unui corp cu altul (de aceeași formă și în aceleași condiții la limită) aceste ecuații nu se schimbă. Așadar, una și aceeași stare tensionată simplă este soluția ecuațiilor în tensiuni ale teoriei elasticității pentru orice corpuri elastice o m o g e n e pe care ni le putem imagina (acest fapt este extrem de important!). În virtutea teoremei unicității, pentru nici unul dintre aceste corpuri nu poate exista nici o altă soluție, diferită.

În acest paragraf și în următoarele vor fi studiate unele exemple practice importante ale aplicării teoremei demonstrate.

Vom începe cu cazurile în care cîmpul tensiunilor este omogen, adică tensorul tensiunilor nu depinde de coordonate. Ecuațiile lui Cauchy sînt în acest caz satisfăcute identic, deci este suficient să se verifice doar dacă sînt satisfăcute și condițiile la limită.

Comprimarea exercitată din toate direcțiile. Dacă asupra unui corp elastic acționează presiunea hidrostatică p, condițiile la limită sînt următoarele

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = -p\boldsymbol{n}, \quad \sigma_{ij}n_j = -pn_i, \tag{53.2}$$

n fiind vectorul unitar al normalei exterioare. Aceste condiţii sînt satisfăcute de condiţia evidentă

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I}, \quad \sigma_{ij} = -p\delta_{ij}. \tag{53.3}$$

Prin urmare, starea tensionată nu depinde absolut deloc de caracteristicile elastice ale corpului. Deformarea însă,

$$\boldsymbol{\varepsilon} = -p\mathbf{s} : \mathbf{I}, \quad \varepsilon_{ij} = -ps_{ijkk} \tag{53.4}$$

depinde substanţial de ele. Tensorul simetric de rangul doi, $S_{ij} = s_{ijkk}$, se numeşte *tensorul coeficienţilor de compresibilitate.* Cu ajutorul lui, deformarea provocată de acţiunea presiunii hidrostatice se scrie sub forma

$$\varepsilon_{ij} = -S_{ij}p, \quad \varepsilon_{\lambda} = -S_{\lambda}p. \tag{53.5}$$

Formulele care exprimă componentele S_{ij} ale tensorului $\mathbf{S}$ prin coeficienţii deformabilităţii elastice, $s_{\lambda\mu}$, pentru toate clasele cristalografice, sînt date în tabelul 53.1. Din tabel se vede, între altele, că efectul simetriei cristalelor asupra deformării lor, în cazul comprimării hidrostatice, este exact acelaşi ca şi asupra

Tabelul 53.1

Tensorul $S_{ij} = s_{ijkk}$ pentru toate clasele cristalografice şi clasele limită

Sistemele	Tensorul $S_{ij} = s_{ijkk}$		
Sistemul triclinic	$s_{11} + s_{31} + s_{12}$	$\frac{1}{2}(s_{16} + s_{26} + s_{36})$	$\frac{1}{2}(s_{15} + s_{25} + s_{35})$
	$\frac{1}{2}(s_{16} + s_{26} + s_{36})$	$s_{22} + s_{12} + s_{23}$	$\frac{1}{2}(s_{14} + s_{24} + s_{34})$
	$\frac{1}{2}(s_{15} + s_{25} + s_{35})$	$\frac{1}{2}(s_{14} + s_{24} + s_{34})$	$s_{33} + s_{23} + s_{31}$
Sistemul monoclinic $2 \parallel X_2$	$s_{11} + s_{31} + s_{12}$	0	$\frac{1}{2}(s_{15} + s_{25} + s_{35})$
	0	$s_{22} + s_{12} + s_{23}$	0
	$\frac{1}{2}(s_{15} + s_{25} + s_{35})$	0	$s_{33} + s_{23} + s_{31}$
	$s_{11} + s_{31} + s_{12}$	$\frac{1}{2}(s_{16} + s_{26} + s_{36})$	0
$2 \parallel X_3$	$\frac{1}{2}(s_{16} + s_{26} + s_{36})$	$s_{22} + s_{12} + s_{23}$	0
	0	0	$s_{33} + s_{23} + s_{31}$
Sistemul rombic	$s_{11} + s_{31} + s_{12}$	0	0
	0	$s_{22} + s_{12} + s_{23}$	0
	0	0	$s_{33} + s_{23} + s_{31}$
Sistemele trigonal, tetragonal, hexagonal şi texturile	$s_{11} + s_{12} + s_{13}$	0	0
	0	$s_{11} + s_{12} + s_{13}$	0
	0	0	$s_{33} + 2s_{13}$
Sistemul cubic şi corpurile izotrope	$s_{11} + 2s_{12}$	0	0
	0	$s_{11} + 2s_{12}$	0
	0	0	$s_{11} + 2s_{12}$

celorlalte proprietăți ale lor, care se exprimă prin tensori simetrici de rangul doi (proprietățile dielectrice, dilatarea termică etc.).

Variația relativă a volumului, sub acțiunea presiunii hidrostatice,

$$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{ii} = - S_{ii} p,$$

este caracterizată de scalarul $K^{-1} = S_{ii} = S_{iikk}$ — *coeficientul de întindere în toate direcțiile*. Mărimea K, inversa mărimii S_{ii}, se numește *modulul de întindere în toate direcțiile*. Variația formei corpurilor elastice anizotrope sub acțiunea presiunii hidrostatice se caracterizează prin deviatorul deformațiilor, $e_{ij} = - R_{ij} p$, care este proporțional cu deviatorul tensorului coeficienților compresibilității

$$R_{ij} = S_{ij} - \frac{1}{3} K^{-1} \delta_{ij}. \tag{53.6}$$

Întinderea după o singură direcție. Să examinăm o bară cilindrică a cărei secțiune, de arie S, este arbitrară, și la capetele căreia se aplică forțele de întindere $S\sigma$, distribuite uniform pe suprafața capetelor; suprafața laterală a barei este liberă de sarcini. Să notăm cu $\boldsymbol{q}$ vectorul unitar îndreptat de-a lungul axei barei. Tensorul tensiunilor,

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma\, \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}, \qquad \sigma_{ij} = \sigma\, q_i q_j, \tag{53.7}$$

satisface, evident, condițiile la limită. De aici, conform legii Hooke, determinăm deformarea

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \sigma\, \mathrm{s} : \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}, \qquad \varepsilon_{ij} = \sigma s_{ijkl} q_k q_l. \tag{53.8}$$

Alungirea relativă a barei este

$$\frac{\Delta l}{l} = \varepsilon_{ij}\, q_i\, q_j = \sigma s_{ijkl}\, q_i\, q_j\, q_k\, q_l.$$

Raportul dintre alungirea relativă și tensiunea σ este mărimea inversă *modulului lui Young*, E, pentru direcția $\boldsymbol{q}$,

$$E^{-1}(\boldsymbol{q}) = s_{ijkl}\, q_i\, q_j\, q_k\, q_l = \boldsymbol{q}\boldsymbol{q} : \mathrm{s} : \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}. \tag{53.9}$$

Calculul modulului lui Young poate fi simplificat introducînd notația

$$q_i q_j = (qq)_\lambda$$

unde

$$ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots 6,$$

atunci componentele tensiunii vor căpăta forma

$$\sigma_\mu = \sigma\,(qq)_\mu$$

cele ale deformării, forma

$$\varepsilon_\lambda = \sigma\, s_{\lambda\mu}\,(qq)_\mu$$

și, în fine, mărimea inversă modulului lui Young, forma

$$E^{-1}(q) = s_{\lambda\mu}\,(qq)_\lambda\,(qq)_\mu. \qquad (53.10)$$

Această formulă este mai comodă decît (53.9) atît prin faptul că cuprinde un număr de termeni considerabil mai mic, cît și prin faptul că valorile $s_{\lambda\mu}$ se iau direct din tabele.

Formulele de calculare a modulului lui Young sînt reunite în tabelul 53.2.

Tabelul 53.2

Mărimea inversă a modulului lui Young, $E^{-1}(q) = E^{-1}_{[hkl]}$, exprimată prin componentele q_i ale vectorului unitar, q, și prin indicii Miller ai direcției cristalografice

Formulele generale

$$E^{-1} = s_{\lambda\mu}\,Q_\lambda\,Q_\mu, \quad \text{unde} \quad Q_\lambda = q_i\,q_j = \frac{A_{\alpha i}\,A_{\beta j}\,h^\alpha\,h^\beta}{g_{\gamma\eta}\,h^\gamma\,h^\eta} \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \dots, 6).$$

Sistemul triclinic

$$E^{-1} = s_{11}Q_1^2 + s_{22}Q_2^2 + s_{33}Q_3^2 + (s_{44} + 2s_{23})\,Q_2Q_3 + (s_{55} + 2s_{31})\,Q_3Q_1 + (s_{66} + 2s_{12})\,Q_1Q_2 + 2\,(s_{14} + s_{56})\,Q_1Q_4 + 2(s_{25} + s_{64})\,Q_2Q_5 + 2(s_{36} + s_{45})\,Q_3Q_6 + 2s_{15}Q_1Q_5 + 2s_{16}Q_1Q_6 + 2s_{26}Q_2Q_6 + 2s_{24}Q_2Q_4 + 2s_{34}Q_3Q_4 + 2s_{35}Q_3Q_5,$$

în care:

$$Q_1 = q_1^2 = (ha \sin\beta - kb \sin\alpha \cos\gamma^*)^2/g,$$
$$Q_2 = q_2^2 = (k/b^*)^2/g,$$
$$Q_3 = q_3^2 = (ha \cos\beta + kb \cos\alpha + lc)^2/g,$$
$$Q_4 = q_2q_3 = (k/b^*)\,(ha \cos\beta + kb \cos\alpha + lc)/g,$$
$$Q_5 = q_3q_1 = (ha \cos\beta + kb \cos\alpha + lc)\,(ha \sin\beta - kb \sin\alpha \cos\gamma^*)/g,$$
$$Q_6 = q_1q_2 = (k/b^*)\,(ha \sin\beta - kb \sin\alpha \cos\gamma^*)/g,$$
$$g = h^2a^2 + k^2b^2 + l^2c^2 + 2klbc \cos\alpha + 2lhca \cos\beta + 2hkab \cos\gamma.$$

Sistemul monoclinic ($2 \parallel X_2$, $m \perp X_2$)

$$E^{-1} = s_{11}Q_1^2 + s_{22}Q_2^2 + s_{33}Q_3^2 + (s_{44} + 2s_{23})\,Q_2Q_3 + (s_{55} + 2s_{31})\,Q_3Q_1 + (s_{66} + 2s_{12})\,Q_1Q_2 + 2\,(s_{25} + s_{64})\,Q_2Q_5 + 2s_{15}Q_1Q_5 + 2s_{35}Q_3Q_5,$$

în care:

$$Q_1 = q_1^2 = (ha \sin \beta)^2/g, \qquad Q_3 = q_3^2 = (ha \cos \beta + lc)^2/g,$$
$$Q_2 = q_2^2 = (kb)^2/g, \qquad Q_5 = q_3q_1 = ha \sin \beta\,(ha \cos \beta + lc)/g,$$
$$g = h^2a^2 + k^2b^2 + l^2c^2 + 2lhca \cos \beta.$$

Sistemul rombic

$$E^{-1} = s_{11}q_1^4 + s_{22}q_2^4 + s_{33}q_3^4 + (s_{44} + 2s_{23})\,q_2^2\,q_3^2 + (s_{55} + 2s_{31})\,q_3^2\,q_1^2 + (s_{66} + 2s_{12})\,q_1^2\,q_2^2 =$$
$$= [h^4a^4s_{11} + k^4b^4s_{22} + l^4c^4s_{33} + k^2l^2b^2c^2\,(s_{44} + 2s_{23}) + l^2h^2c^2a^2\,(s_{55} + 2s_{31}) + h^2k^2\alpha^2b^2\,(s_{66} + 2s_{12})]/(h^2a^2 + k^2b^2 + l^2c^2)^2.$$

Sistemul tetragonal

$$E^{-1} = s_{11}(q_1^4 + q_2^4) + s_{33}q_3^4 + (s_{44} + 2s_{13})\,(q_1^2 + q_2^2)\,q_3^2 + (s_{66} + 2s_{12})\,q_1^2\,q_2^2 + 2s_{16}q_1q_2\,(q_1^2 - q_2^2) =$$
$$= \{a^4\,[(h^4 + k^4)\,s_{11} + h^2k^2\,(s_{66} + 2s_{12}) + 2hk\,(h^2 - k^2)\,s_{16}] + l^4c^4s_{33} + (h^2 + k^2)\,l^2a^2c^2\,(s_{44} + 2s_{13})\}/[(h^2 + k^2)\,a^2 + l^2c^2]^2;$$

în clasele 4, $\overline{4}$, $4/m$ toți coeficienții $s_{\lambda\mu}$ sînt diferiți de zero, în clasele 422, $4mm$, $4/mmm$ coeficientul $s_{16} = 0$.

Sistemele trigonal și hexagonal
(în structură hexagonală) și texturile

$$E^{-1} = s_{11}\,(1 - q_3^2)^2 + s_{33}q_3^4 + (s_{44} + 2s_{13})\,q_3^2(1 - q_3^2) + 2s_{14}\,(3q_1^2 - q_2^2)\,q_2q_3 + 2s_{25}\,(3q_2^2 - q_1^2)\,q_1q_3 =$$
$$= \{(h^2 + k^2 - hk)^2\,a^4s_{11} + l^4c^4s_{33} + (h^2 + k^2 - hk)\,l^2a^2c^2\,(s_{44} + 2s_{13}) + a^3c\,[3\sqrt{3}\,hkl\,(h - k)\,s_{14} + l\,(2h - k)\,(2k^2 - h^2 + hk)\,s_{25}]\} : [(h^2 + k^2 - hk)\,a^2 + l^2c^2]^2;$$

în clasele 3, $\overline{3}$ toate componentele $s_{\lambda\mu}$ sînt diferite de zero, în clasele 32, $3m$, $\overline{3}m$ coeficientul $s_{25} = 0$,
în sistemul hexagonal și în texturi coeficienții $s_{14} = s_{25} = 0$.

Sistemul cubic

$$E^{-1} = s_{11} - (2s_{11} - 2s_{12} - s_{44})\,(q_2^2\,q_3^2 + q_3^2\,q_1^2 + q_1^2\,q_2^2) =$$
$$= s_{11} - (2s_{11} - 2s_{12} - s_{44})\,(k^2l^2 + l^2h^2 + h^2k^2)/(h^2 + k^2 + l^2)^2.$$

Corpurile izotrope

$$E^{-1} = s_{11}.$$

Notații: $s_{\lambda\mu}$ — coeficienții deformabilității elastice, a, b, c, α, β — parametrii rețelei cristaline, b^*, γ^* — parametrii rețelei reciproce, $A_{\alpha i}$, $g_{\gamma\eta}$ — v. anexa B.

Variaţia relativă a grosimii barei, mai exact, dimensiunile ei liniare în direcţia $\boldsymbol{m}$, perpendiculară pe direcţia de întindere, este egală cu

$$\frac{\Delta l(\boldsymbol{m})}{l(\boldsymbol{m})} = \varepsilon_{ij}\, m_i\, m_j\,.$$

Să exprimăm deformarea prin tensiune; atunci

$$\frac{\Delta l(\boldsymbol{m})}{l(\boldsymbol{m})} = \sigma s_{ijkl}\, m_i\, m_j\, q_k\, q_l\,.$$

Raportul dintre variaţia grosimii barei şi variaţia lungimii ei, luat cu semn schimbat, se numeşte, în teoria elasticităţii corpurilor izotrope, coeficientul lui Poisson, ν. Dacă extindem această noţiune asupra corpurilor anizotrope, coeficientul lui Poisson va fi o funcţie de două direcţii ortogonale, $\boldsymbol{q}$ şi $\boldsymbol{m}$

$$\nu(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{m}) = -\frac{\Delta l(\boldsymbol{m})/l(\boldsymbol{m})}{\Delta l(\boldsymbol{q})/l(\boldsymbol{q})} = \frac{s_{ijkl}\, m_i\, m_j\, q_k\, q_l}{s_{nprt}\, q_n\, q_p\, q_r\, q_t} =$$

$$= -\frac{\boldsymbol{m}\boldsymbol{m} : \boldsymbol{s} : \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}}{\boldsymbol{q}\boldsymbol{q} : \boldsymbol{s} : \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}}\,. \qquad (53.11)$$

O variantă mai adecvată pentru calcule este următoarea formă de scriere a relaţiei

$$\nu(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{m}) = -\frac{s_{\lambda\mu}(\boldsymbol{m}\boldsymbol{m})_\lambda\ (\boldsymbol{q}\boldsymbol{q})_\mu}{s_{\rho\sigma}(\boldsymbol{q}\boldsymbol{q})_\rho\ (\boldsymbol{q}\boldsymbol{q})_\sigma}\,. \qquad (53.12)$$

Coeficientul Poisson al unui mediu elastic anizotrop poate fi definit şi astfel încît el să depindă nu de doi vectori unitari, ci numai de unul, dacă l-am fi interpretat drept o caracteristică a variaţiei ariilor în planurile perpendiculare pe direcţia de întindere

$$\nu = -\frac{\Delta S(\boldsymbol{q})/S(\boldsymbol{q})}{2\,\Delta l(\boldsymbol{q})/l(\boldsymbol{q})}\,. \qquad (53.13)$$

Deoarece

$$\frac{\Delta S(\boldsymbol{q})}{S(\boldsymbol{q})} = \boldsymbol{\varepsilon} : (\mathbf{I} - \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}) = \varepsilon_{ij}\,(\delta_{ij} - q_i\, q_j),$$

iar deformările se vor calcula după formula (53.8),

$$\nu(q) = -\frac{qq : s : (I - qq)}{2\, qq : s : qq} = \frac{s_{ijkl}\, q_i\, q_j\, (\delta_{kl} - q_k\, q_l)}{2 s_{nprt}\, q_n\, q_p\, q_r\, q_t}. \tag{53.14}$$

Observînd că $(qq : s : qq)^{-1}$ este modulul lui Young, $E(q)$, iar $qq : : s : I = q \cdot S \cdot q$ este componenta normală a tensorului coeficienţilor de compresibilitate, S, în direcţia q, obţinem

$$\nu(q) = \frac{1}{2}[1 - q \cdot S \cdot q\, E(q)]. \tag{53.15}$$

În cazul întinderii după o singură direcţie, volumul barei variază (de obicei, se măreşte). Variaţia relativă a volumului, $\Delta V/V = \varepsilon_{ii}$, este egală, în acest caz, cu

$$\frac{\Delta V}{V} = \sigma\, S_{ij}\, q_i\, q_j = \sigma q \cdot S \cdot q, \tag{53.16}$$

unde S este tensorul coeficienţilor de compresibilitate. Comparînd acest rezultat cu formula (53.15) pentru coeficientul Poison, $\nu(q)$, vedem că formula cunoscută,

$$\frac{\Delta V}{V} = (1 - 2\nu)\ \sigma/E$$

care defineşte variaţia relativă a volumului în cazul unei întinderi într-o singură direcţie a corpurilor izotrope, sub forma

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{1 - 2\nu(q)}{E(q)}\sigma \tag{53.17}$$

este valabilă şi pentru corpurile anizotrope.

Pe baza exemplului coeficienţilor lui Poisson, $\nu(q, m)$ şi $\nu(q)$, ne-am convins o dată în plus că una şi aceeaşi mărime, care defineşte o anumită proprietate a corpului izotrop, poate fi generalizată prin diferite procedee şi pentru corpurile anizotrope, alegerea uneia sau alteia dintre generalizări depinzînd numai de proprietatea corpului anizotrop pe care anume vrem să-l definim.

Forfecarea. Să presupunem că pe feţele laterale ale unei bare paralelipipedice sînt aplicate forţe uniform distribuite, tangente

la fețe; sub acțiunea acestui sistem de forțe, bara se află în echilibru. Pe unitatea de suprafață se exercită forța σ. Capetele sînt libere de sarcini. În acest caz, tensiunile din bară se numesc *tensiuni de forfecare*; ele sînt egale cu

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma(\boldsymbol{pq} + \boldsymbol{qp}), \quad \sigma_{ij} = \sigma\,(p_i\, q_j + q_i\, p_j) \tag{53.18}$$

($\boldsymbol{p}$ și $\boldsymbol{q}$ fiind vectori unitari ai normalelor la fețele laterale). Deformarea poate fi reprezentată sub forma

$$\boldsymbol{\varepsilon} = 2\,\sigma \mathbf{s} : \boldsymbol{pq}, \quad \varepsilon_{ij} = 2\,\sigma s_{ijkl}\, p_k\, q_l \tag{53.19}$$

(folosind caracterul simetric al tensorului $\mathbf{s}$ în raport cu ultimii doi indici). Un interes deosebit îl prezintă componenta de forfecare a tensorului de deformare,

$$\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{q} = 2\,\sigma\, \boldsymbol{pq} : \mathbf{s} : \boldsymbol{pq} = 2\,\sigma s_{ijkl}\, p_i\, q_j\, p_k\, q_l.$$

Raportul dintre forța care se exercită asupra unității de arie a suprafeței și dublul componentei de forfecare a tensorului de deformare se numește *modul de forfecare*, $G(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q})$, pentru perechea de direcții ortogonale, $\boldsymbol{p}$ și $\boldsymbol{q}$. Modulul de forfecare este dat de formula

$$G^{-1}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = 4\boldsymbol{pq} : \mathbf{s} : \boldsymbol{pq} = 4 s_{ijkl}\, p_i\, q_j\, p_k\, q_l. \tag{53.20}$$

O formulă mai comodă pentru calcule este

$$G^{-1}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = s_{\lambda\mu}(\boldsymbol{pq} + \boldsymbol{qp})_\lambda\, (\boldsymbol{pq} + \boldsymbol{qp})_\mu, \tag{53.21}$$

unde

$$(\boldsymbol{pq} + \boldsymbol{qp})_\lambda = p_i\, q_j + q_i\, p_j \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots 6).$$

Pentru deducerea acestei formule, vezi anexa F.

Formulele (53.20) și (53.21) arată că modulul de forfecare, $G(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q})$, este simetric în raport cu direcțiile $\boldsymbol{p}$ și $\boldsymbol{q}$

$$G(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = G(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}). \tag{53.22}$$

În ciuda faptului că realizarea experimentală a unei distribuții a forțelor tangențiale asupra unei suprafețe, cu o precizie oricît de modestă, este foarte dificilă, totuși modulul de forfecare, definit de formula (53.22) joacă un rol deosebit de important în teoria dislocațiilor. Anume, dacă $\boldsymbol{n}$ este vectorul unitar al normalei la

Tabelul 53.3

Modulul de forfecare, $G(n, l)$, pentru sistemele de alunecare ale unor cristale

Sistemul de alunecare	Mărimea inversă modulului de forfecare $G^{-1}(n, l)$	Cristalele
	Sistemul triclinic	
(100) [001]	$s_{44} \cos^2\gamma^* + s_{55} \sin^2 \gamma^* + 2s_{45} \sin \gamma^* \cos \gamma^*$	disten
	Sistemul monoclinic	
(010) [001]	s_{44}	ghips
	Sistemul rombic	
(010) [100]	s_{66}	aragonit ($CaCO_3$)
(010) [001]	s_{44}	antimonit
	Sistemul trigonal, clasele 32, 3*m*, $\bar{3}m$	
$(111)\ [01\bar{1}] = (0001)[\bar{1}2\bar{1}0]$	s_{44}	Bi, calcit
$(100)\ [01\bar{1}] = (10\bar{1}1)\ [\bar{1}2\bar{1}0]$	$\frac{8c^2 (s_{11} - s_{12}) + 3a^2 s_{44} - 8ac\sqrt{3}\, s_{14}}{3a^2 + 4c^2}$	calcit ($CaCO_3$)
	Sistemul tetragonal, clasele 422, 4*mm*, $\bar{4}2m$, 4/*mmm*	
(100) [001]	s_{44}	β-Sn
(110) [011]	s_{44}	β-Sn
$(1\bar{1}0)$ [111]	$\frac{4a^2 (s_{11} - s_{12}) + c^2 s_{44}}{2a^2 + c^2}$	β-Sn, $NH_4H_2PO_4$
$(101)\ [00\bar{1}]$	$\frac{4a^2c^2 (s_{11} + s_{33} - 2s_{13}) + (a^2 - c^2)\, s_{44}}{(a^2 + c^2)^2}$	β-Sn
$(11\bar{2})$ [111]	$\frac{2a^2c^2(2s_{11} + 4s_{33} + s_{66} + 2s_{12} - 8s_{13}) + (2a^2 - c^2)\, s_{44}}{(2a^2 + c^2)^2}$	$NH_4H_2PO_4$
$(121)\ [10\bar{1}]$	$\frac{4a^2c^2(s_{11} + s_{33} + s_{66} - 2s_{13}) + (a^2 + 5c^2 - 2a^2c^2)\, s_{44}}{(a^2 + c^2)(a^2 + 5c^2)}$	β-Sn

Tabelul 53.3 (continuare)

Sistemul de alunecare	Mărimea inversă modulului de forfecare $G^{-1}(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{l})$	Cristalele
	Sistemul hexagonal	
$(0001)\ [11\bar{2}0]$	s_{44}	Zn, Cd, Mg, Ti, Be, Co
$(01\bar{1}0)\ [\bar{2}110]$	$2(s_{11} - s_{12})$	Zn, Cd, Mg, Ti, Be
$(\bar{0}111)\ [2\bar{1}10]$	$\dfrac{8c^2(s_{11} - s_{12}) + 3a^2 s_{44}}{3a^2 + 4c^2}$	Ti
$(1\bar{2}12)\ [10\bar{1}0]$	$\dfrac{2c^2(s_{11} - s_{12}) + a^2 s_{44}}{a^2 + c^2}$	Mg
$(\bar{1}122)\ [11\bar{2}3]$	$\dfrac{4a^2c^2(s_{11} + s_{33} - 2s_{13}) + (a^2 - c^2)^2 s_{44}}{(a^2 + c^2)^2}$	Zn, Cd, Co
	Sistemul cubic	
$(001)\ [100]$	s_{44}	TlBr-TlI
$(001)\ [110]$	s_{44}	Al
$(110)\ [001]$	s_{44}	NH_4Cl, NH_4Br, PbS, PbTe, AuZn, TlCl-TlBr, TlBr-TlI
$(110)\ [1\bar{1}0]$	$2(s_{11} - s_{12})$	NaCl, KCl, KBr, KI, AgCl, LiF
$(1\bar{1}0)\ [111]$	$\dfrac{4}{3}(s_{11} - s_{12}) + \dfrac{1}{3}s_{44}$	α-Fe, Mo, Nb, β-CuZn
$(111)\ [1\bar{1}0]$	$\dfrac{4}{3}(s_{11} - s_{12}) + \dfrac{1}{3}s_{44}$	Ge, Ag, Au, Ni, Cu, CuAu, AlCu, AlZn, α-CuZn
$(11\bar{2})\ [111]$	$\dfrac{4}{3}(s_{11} - s_{12}) + \dfrac{1}{3}s_{44}$	α-Fe
$(12\bar{3})\ [111]$	$\dfrac{4}{3}(s_{11} - s_{12}) + \dfrac{1}{3}s_{44}$	αFe, AgMg

Notaţiile: a, c — parametrii reţelei, γ^* — unghiul dintre vectorii bazei reţelei reciproce

planul de alunecare, iar $\boldsymbol{l}$ este vectorul unitar al direcţiei de alunecare, atunci pentru dislocaţiile care acţionează în sistemul de alunecare dat, cea mai importantă caracteristică a proprietăţilor elastice ale cristalului o va reprezenta tocmai modulul de forfecare, $G(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{l})$.

Dacă elementele de alunecare — planul şi direcţia — sînt date cu ajutorul indicilor Miller, $(n_1 n_2 n_3)$ şi $[l^1 l^2 l^3]$, mărimea inversă modulului de forfecare poate fi calculată după formula

$$G^{-1}(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{l}) = \frac{s_{ijkm}\, E_i^\alpha\, E_k^\beta\, A_{\gamma j}\, A_{\delta m}\, n_\alpha\, n_\beta\, l^\gamma\, l^\delta}{g^{\varepsilon\xi}\, n_\varepsilon\, n_\xi\, q_{\eta\zeta}\, l^\eta\, l^\zeta}, \qquad (53.23)$$

în care E_i^α şi $A_{\gamma j}$ sînt elementele matricelor care leagă versorii sistemului de coordonate cristalofizic de vectorii bazei reţelei cristaline (vezi § 16 şi anexa B). Rezultatele unor astfel de calcule, pentru o serie de cristale, sînt date în tabelul 53.3.

Spre deosebire de corpurile izotrope, corpurile anizotrope, sub acţiunea tensiunilor de forfecare suferă o dilatare în volum (sau o contracţie). Ea este egală cu

$$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{ii} = 2\sigma\, s_{iikl}\, p_k\, q_l = 2\sigma S_{kl}\, p_k\, q_l,$$

unde S este tensorul coeficienţilor de compresibilitate. Deoarece vectorii $\boldsymbol{p}$ şi $\boldsymbol{q}$ sînt ortogonali, $\delta_{kl} p_k q_l = 0$; de aici rezultă că dilatarea în volum, sub acţiunea tensiunilor de forfecare este determinată de deviatorul tensorului de întindere în toate direcţiile,

$$\frac{\Delta V}{V} = 2\sigma\, R_{kl}\, p_k\, q_l. \qquad (53.24)$$

§ 54. ÎNCOVOIEREA ŞI TORSIONAREA CRISTALELOR

În paragraful precedent au fost studiate stările de tensionare simple, pentru care tensorul tensiunilor nu depinde de coordonatele carteziene; în acest paragraf se vor examina cîteva stări de tensionare simple, caracterizate printr-o dependenţă liniară de coordonate.

Încovoierea unei bare cristaline paralelipipedice. Să examinăm o bară cristalină paralelipipedică de lungime $2c$, lăţime $2a$ şi grosime $2b$, la ale cărei capete sînt aplicate momentele de încovoiere $\boldsymbol{M}$ şi, respectiv, $-\boldsymbol{M}$. Vom ataşa barei un sistem de coordonate

cartezian, care este, în general, necristalofizic, $OX_1'X_2'X_3'$, așa cum se arată în figura 54.1. Vom nota versorii e_1', e_2' și e_3' ai acestui reper cu $\boldsymbol{m}$, $\boldsymbol{n}$ și $\boldsymbol{q}$. Momentele de încovoiere, $\boldsymbol{M}$ și $-\boldsymbol{M}$, pot fi create, în particular (aici se utilizează *principiul Saint-Venant*; vezi Leibenzon, 1947, § 49) de un sistem de sarcini, reprezentat schematic în figura 54.1: capătului $x_3' = c$ i se aplică forțele

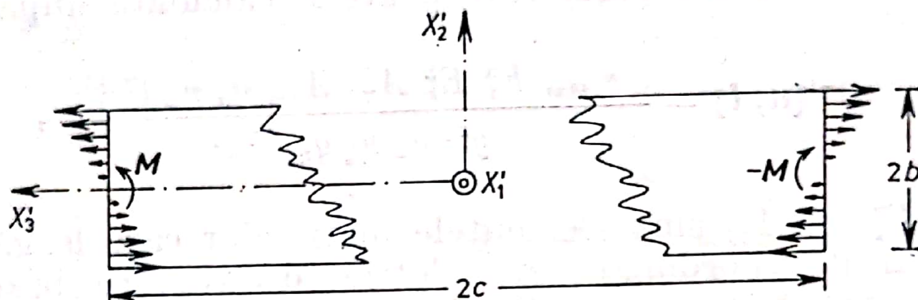


Fig. 54.1. Încovoierea unei bare cristaline — sistemul special de coordonate, eforturile și momentele de încovoiere.

$\boldsymbol{P} = kx_2'\boldsymbol{q}$ (pe unitatea de suprafață), iar capătului $x_3' = -c$ i se aplică forțele $-\boldsymbol{P}$.

Momentul de încovoiere al forțelor aplicate capătului $x_3' = c$ este

$$\boldsymbol{M} = \int_S x_2' \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{P}\, \mathrm{d}S = \int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b} x_2' \boldsymbol{n} \times k\, x_2'\, \boldsymbol{q}\, \mathrm{d}x_1'\, \mathrm{d}x_2' =$$

$$= \frac{4}{3}\, ab^3 k\, \boldsymbol{m}\,; \tag{54.1}$$

de unde se obține $k = 3M/4ab^3$ și exprimăm condițiile la limită de la capetele barei, $x_3' = \pm c$. Ele sînt egale cu $\boldsymbol{\sigma}\cdot(\pm\boldsymbol{q}) = \pm(3M/4ab^3)x_2'\boldsymbol{q}$. Aceste condiții la limită (cît și ecuațiile echilibrului elastic) sînt satisfăcute de tensorul tensiunilor

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{3M}{4ab^3}\, x_2'\, \boldsymbol{qq}\,; \tag{54.2}$$

în sistemul de coordonate special fiind diferită de zero numai o singură componentă a sa, $\sigma_3' = (3M/4ab^3)x_2'$. Conform legii Hooke, componentele tensorului deformărilor sînt

$$\varepsilon_\lambda' = \frac{3M}{4ab^3}\, s_{\lambda 3}'\, x_2'. \tag{54.3}$$

Ca şi în formulele precedente, semnele „prim" înseamnă că mărimea tensorială dată nu se referă la un sistem de coordonate cristalografic, ci la sistemul special de coordonate. Astfel, coeficienţii $s'_{\lambda 3}$ nu coincid nici pe departe cu valorile tabelate ale coeficienţilor de deformabilitate elastică, de îndată ce muchiile barei nu sînt orientate după axele corespunzătoare ale sistemului de coordonate cristalofizic; ele sînt legate de valorile tabelate ale coeficienţilor de deformabilitate elastică ai unui cristal dat, $s_{\mu\nu}$, prin relaţiile

$$s'_{\lambda 3} = P_{\lambda'\mu}\, P_{3'\nu}\, s_{\mu\nu},$$

în care elementele matricei de transformare, $P_{\lambda'\nu}$, sînt determinate de cosinuşii unghiurilor dintre axele de coordonate ale sistemului special şi cele ale sistemului cristalofizic, $c_{i'j} = \cos\,(X'_i\, X_j)$, aşa cum se arată în anexa F.

Încovoierea barei se caracterizează prin variaţia continuă a componentei φ'_1 a vectorului micilor rotaţii, în cazul deplasării de-a lungul barei, adică în direcţia axei X'_3: încovoierea este $\psi = \partial\varphi'_1/\partial x'_3$. Conform formulei (49.17),

$$\frac{\partial \varphi'_1}{\partial x'_3} = \mathrm{Rot}\ \boldsymbol{\varepsilon}'_{13}.$$

Calculînd după formula (49.13) membrul din dreapta al acestei egalităţi, obţinem

$$\psi = \frac{\partial \varepsilon'_{33}}{\partial x'_2} - \frac{\partial \varepsilon'_{23}}{\partial x'_3} = \frac{\partial \varepsilon'_3}{\partial x'_2} - \frac{1}{2}\frac{\partial \varepsilon'_4}{\partial x'_3}. \qquad (54.4)$$

Înlocuind aici expresia pentru componentele tensorului deformărilor, (54.3), vom obţine

$$\psi = \frac{3 s'_{33}}{4ab^3}\, M. \qquad (54.5)$$

Raportul $D = M/\psi$ se numeşte, de obicei, *rigiditatea* barei *la încovoiere*. Remarcînd că $1/s'_{33}$ este modulul Young, $E(\boldsymbol{q})$, în direcţia lungimii barei, obţinem

$$D(\boldsymbol{q}) = \frac{4}{3}\, ab^3\, E(\boldsymbol{q}). \qquad (54.6)$$

Se constată deci că rigiditatea la încovoiere nu depinde de orientarea vectorilor $\boldsymbol{m}$ şi $\boldsymbol{n}$ (cînd direcţia vectorului $\boldsymbol{q}$ este dată).

Spre deosebire de corpurile izotrope, corpurile anizotrope se răsucesc atunci cînd sînt încovoiate. Este firesc ca răsucirea barei să fie definită prin variaţia componentei φ_3' a vectorului axial al micilor rotaţii de-a lungul axei barei, X_3', adică prin derivata $\theta = \partial\varphi_3'/\partial x_3'$. Folosind din nou formulele (49.17) şi (49.13), obţinem

$$\theta = \frac{\partial \varepsilon_{23}'}{\partial x_1'} - \frac{\partial_{13}'}{\partial x_2'} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \varepsilon_4'}{\partial x_1'} - \frac{\partial \varepsilon_5'}{\partial x_2'}\right), \tag{54.7}$$

în care, introducînd expresia (54.3) pentru componentele tensorului deformărilor, găsim

$$\theta = -\frac{3s_{35}'}{8ab^3}M. \tag{54.8}$$

Observînd că

$$s_{35}' = 2s_{3331}' = 2\boldsymbol{qq} : \mathrm{s} : \boldsymbol{qm},$$

vom raporta răsucirea la un sistem de coordonate arbitrar

$$\theta = -\frac{3M}{4ab^3}\, s_{ijkl}\, q_i\, q_j\, q_k\, m_l. \tag{54.9}$$

Această formulă este valabilă, în particular, şi într-un sistem de coordonate cristalofizic. Pentru ca în calcule să poată fi utilizate direct valorile tabelate ale coficienţilor deformabilităţii elastice $s_{\lambda\mu}$, este oportun ca formula (54.9) să fie adusă la forma

$$\theta = -\frac{3M}{8ab^3}\, s_{\lambda\mu}(\boldsymbol{qq})_\lambda\, (\boldsymbol{qm}+\boldsymbol{mq})_\mu\,;$$

$$(\boldsymbol{qq})_\lambda = q_i\, q_j \qquad (ij \leftrightarrow \lambda = 1,\ldots,6), \tag{54.10}$$

$$(\boldsymbol{qm}+\boldsymbol{mq})_\mu = q_k\, m_l + m_k\, q_l \quad (kl \leftrightarrow \mu = 1,\ldots,6).$$

Prin încovoiere, volumul barei nu variază : alungirea uneia dintre jumătăţi este compensată de scurtarea celeilalte jumătăţi.

Torsionarea unei bare cristaline cilindrice. Să studiem o bară cilindrică, anizotropă, de rază R şi de lungime $2l$, la capetele căreia se aplică momentele de torsiune $\boldsymbol{K}$ şi $-\boldsymbol{K}$, suprafaţa ei laterală fiind liberă de sarcini. Vom introduce un sistem de coor-

donate cartezian, special, în general diferit de sistemul cristalofizic, avînd originea în centrul barei, a cărui axă X_3' (cu versorul $\boldsymbol{e}_3' = \boldsymbol{q}$) coincide cu axa barei; celelalte axe, X_1' şi X_2' (cu versorii $\boldsymbol{e}_1' = \boldsymbol{m}$ şi $\boldsymbol{e}_2' = \boldsymbol{n}$) fiind perpendiculare la axa X_3' şi ortogonale între ele, în rest fiind arbitrare. În afară de aceasta, să introducem în fie-

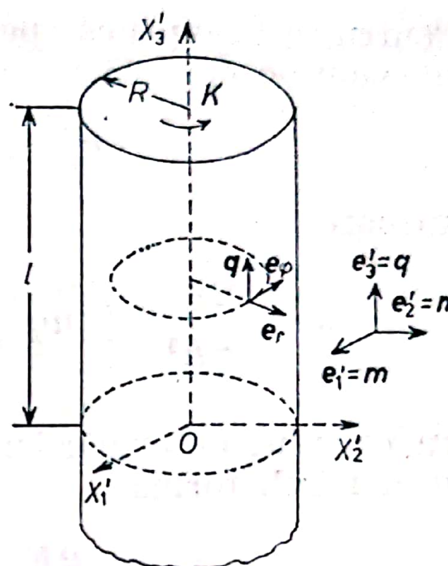


Fig. 54.2. Torsiunea unei bare cilindrice — sistemul de coordonate special şi sistemul de coordonate local.

care punct un sistem de coordonate local, construit pe versorii $\boldsymbol{e}_r$, $\boldsymbol{e}_\varphi$ şi $\boldsymbol{q}$, orientaţi după coordonatele liniare ale unui sistem de coordonate cilindric (fig. 54.2). Sistemul de coordonate cilindric este legat de reperul special prin relaţiile

$$x_1' = r\cos\varphi, \quad x_2' = r\sin\varphi.$$

Momentul de torsiune, $\boldsymbol{K}$, poate fi determinat, în particular, de forţele $\boldsymbol{P} = kr\boldsymbol{e}_\varphi$, aplicate capătului $x_3' = l$, raportate la unitatea de suprafaţă. Atunci

$$\boldsymbol{K} = \int_S \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{P}\,\mathrm{d}S = \int_0^{2\pi}\int_0^R r\boldsymbol{e}_r \times kr\boldsymbol{e}_\varphi\, r\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi = \frac{1}{2}\pi R^4 k\boldsymbol{q}, \tag{54.11}$$

de unde găsim

$$k = \frac{2K}{\pi R^4}.$$

Condiţiile la limită

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{q} = \frac{2K}{\pi R^4} r\boldsymbol{e}_\varphi, \quad \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{e}_r = 0$$

sînt satisfăcute de tensorul tensiunilor

$$\sigma = \frac{2K}{\pi R^4} r(e_\varphi q + q e_\varphi). \qquad (54.12)$$

Pentru a-l exprima pe acesta în sistemul de coordonate special, vom observa că

$$r e_\varphi = x_1' n - x_2' m.$$

Prin urmare,

$$\sigma = \frac{2K}{\pi R^4}[x_1' (nq + qn) - x_2'(mq + qm)]. \qquad (54.13)$$

Pentru calculul deformărilor, să scriem componentele tensorului tensiunilor sub forma

$$\sigma_\mu' = \frac{2K}{\pi R^4} (x_1' \delta_{4\mu} - x_2' \delta_{5\mu}); \qquad (54.14)$$

această formă de exprimare rezultă direct din (54.13). Deformările sînt egale cu

$$\varepsilon_\lambda' = \frac{2K}{\pi R^4} (s_{\lambda 4}' x_1' - s_{\lambda 5}' x_2'). \qquad (54.15)$$

Torsionarea de-a lungul axei, pe o unitate de lungime a barei, este egală cu

$$\theta = \frac{\partial \varphi_3'}{\partial x_3'}.$$

Utilizînd, din nou, formulele (49.17) și (43.13), găsim

$$\theta = \frac{\partial \varepsilon_{23}'}{\partial x_1'} - \frac{\partial \varepsilon_{13}'}{\partial x_2'} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \varepsilon_4'}{\partial x_1'} - \frac{\partial \varepsilon_5'}{\partial x_2'}\right). \qquad (54.16)$$

Ținînd cont de (54.15), obținem

$$\theta = \frac{K}{\pi R^4} (s_{44}' + s_{55}'). \qquad (54.17)$$

Raportul $C = K/\theta$ se numeşte *rigiditatea* barei *la torsiune*; evident,

$$C = \frac{\pi R^4}{(s'_{44} + s'_{55})}. \tag{54.18}$$

Pentru a exprima rigiditatea prin valorile tabelate ale coeficienţilor de deformabilitate elastică, să examinăm expresia

$$\frac{1}{4}(s'_{44} + s'_{55}) = s'_{2323} + s'_{1313} = s'_{2323} + s'_{1313} + s'_{3333} - s'_{3333} = s'_{k3k3} - s'_{3333}.$$

Aici, coeficienţii deformabilităţii elastice sînt, ca şi mai înainte, raportaţi la sistemul special de coordonate, ei putînd fi exprimaţi însă acum cu ajutorul versorului unic, $\boldsymbol{q}$, care este orientat după axa de coordonate X'_3. Deoarece într-un sistem cartezian arbitrar de coordonate, această expresie poate fi pusă sub forma

$$s_{kjkl}\, q_j\, q_l - s_{ijkl}\, q_i\, q_j\, q_k\, q_l = s_{ijkl}\,(\delta_{ik} - q_i\, q_k) q_j\, q_l,$$

în care q_i sînt componentele vectorului unitar, $\boldsymbol{q}$, al acestui sistem, rigiditatea barei la torsiune fiind

$$C(\boldsymbol{q}) = \frac{\pi R^4}{4 s_{ijkl}(\delta_{ik} - q_i\, q_k) q_j\, q_l}. \tag{54.19}$$

În cazul unui corp izotrop, $s_{44} = s_{55} = 1/G$ (G fiind modulul de forfecare), astfel încît rigiditatea sa la torsiune este

$$C = \frac{1}{2}\frac{\pi R^4}{G}.$$

Din această cauză, mărimea

$$G(\boldsymbol{q}) = \frac{2C(\boldsymbol{q})}{\pi R^4} = \frac{1}{2 s_{ijkl}(\delta_{ik} - q_i\, q_k) q_j\, q_l} \tag{54.20}$$

este denumită *modul de forfecare la torsiune al unui material anizotrop*. Cu ajutorul tensorului de material simetric, de rangul doi, $Z_{jl} = s_{kjkl}$, şi al formulei (53.9), se poate reprezenta mărimea inversă modulului de forfecare, $G^{-1}(\boldsymbol{q})$, într-un mod adecvat pentru calcule

$$G^{-1}(\boldsymbol{q}) = 2(\boldsymbol{q} \cdot \mathbf{Z} \cdot \boldsymbol{q} - E^{-1}(\boldsymbol{q})), \tag{54.21}$$

unde $E^{-1}(\boldsymbol{q})$ este mărimea inversă modulului lui Young. Forma tensorului $\mathbf{Z}$, pentru toate clasele de simetrie elastice, este dată în tabelul 54.1.

Tabelul 54.1

Tensorul $Z_{ij} = s_{ikjk}$ pentru toate clasele cristalografice și clasele limită

Sistemele	$Z_{ij} = s_{ikjk}$		
Sistemul triclinic	$s_{11} + \frac{1}{4} s_{55} + \frac{1}{4} s_{66}$	$\frac{1}{4} s_{45} + \frac{1}{2} s_{16} + \frac{1}{4} s_{26}$	$\frac{1}{4} s_{64} + \frac{1}{4} s_{35} + \frac{1}{2} s_{15}$
	$\frac{1}{4} s_{45} + \frac{1}{2} s_{16} + \frac{1}{2} s_{26}$	$s_{22} + \frac{1}{4} s_{66} + \frac{1}{4} s_{44}$	$\frac{1}{4} s_{56} + \frac{1}{2} s_{24} + \frac{1}{2} s_{34}$
	$\frac{1}{4} s_{64} + \frac{1}{2} s_{35} + \frac{1}{2} s_{15}$	$\frac{1}{4} s_{56} + \frac{1}{2} s_{24} + \frac{1}{2} s_{34}$	$s_{33} + \frac{1}{4} s_{44} + \frac{1}{4} s_{55}$
Sistemul monoclinic $2 \parallel X_2$	$s_{11} + \frac{1}{4} s_{55} + \frac{1}{4} s_{66}$	0	$\frac{1}{4} s_{64} + \frac{1}{2} s_{35} + \frac{1}{2} s_{15}$
	0	$s_{22} + \frac{1}{4} s_{66} + \frac{1}{4} s_{44}$	0
	$\frac{1}{4} s_{64} + \frac{1}{2} s_{35} + \frac{1}{2} s_{15}$	0	$s_{33} + \frac{1}{4} s_{44} + \frac{1}{4} s_{55}$
$2 \parallel X_3$	$s_{11} + \frac{1}{4} s_{55} + \frac{1}{4} s_{66}$	$\frac{1}{4} s_{45} + \frac{1}{2} s_{16} + \frac{1}{2} s_{26}$	0
	$\frac{1}{4} s_{45} + \frac{1}{2} s_{16} + \frac{1}{2} s_{26}$	$s_{22} + \frac{1}{4} s_{66} + \frac{1}{4} s_{44}$	0
	0	0	$s_{33} + \frac{1}{4} s_{44} + \frac{1}{4} s_{55}$
Sistemul rombic	$s_{11} + \frac{1}{4} s_{55} + \frac{1}{4} s_{66}$	0	0
	0	$s_{22} + \frac{1}{4} s_{66} + \frac{1}{4} s_{44}$	0
	0	0	$s_{33} + \frac{1}{4} s_{44} + \frac{1}{4} s_{55}$
Sistemul tetragonal	$s_{11} + \frac{1}{4} s_{44} + \frac{1}{4} s_{66}$	0	0
	0	$s_{11} + \frac{1}{4} s_{44} + \frac{1}{4} s_{66}$	0
	0	0	$s_{33} + \frac{1}{2} s_{44}$
Sistemele trigonal și hexagonal și texturile	$\frac{3}{4} s_{11} - \frac{1}{2} s_{12} + \frac{1}{4} s_{44}$	0	0
	0	$\frac{3}{2} s_{11} + \frac{1}{4} s_{44} + \frac{1}{4} s_{66}$	0
	0	0	$s_{33} + \frac{1}{2} s_{44}$
Sistemul cubic	$s_{11} + \frac{1}{2} s_{44}$	0	0
	0	$s_{11} + \frac{1}{2} s_{44}$	0
	0	0	$s_{11} + \frac{1}{2} s_{44}$
Corpurile izotrope	$2s_{11} - \frac{1}{2} s_{44}$	0	0
	0	$2s_{11} - s_{12}$	0
	0	0	$2s_{11} - s_{12}$

Dat fiind că barele anizotrope se torsionează la încovoiere, ne putem aştepta ca ele să se încovoaie la torsiune. Şi, într-adevăr, calculînd

$$\psi_1' = \frac{\partial \varphi_1'}{\partial x_3'} = \frac{\partial \varepsilon_{33}'}{\partial x_2'} - \frac{\partial \varepsilon_{23}'}{\partial x_3'} = -\frac{2K}{\pi R^4} s_{35}',$$

$$\psi_2' = \frac{\partial \varphi_2'}{\partial x_3'} = \frac{\partial \varepsilon_{13}'}{\partial x_3'} - \frac{\partial \varepsilon_{33}'}{\partial x_1'} = -\frac{2K}{\pi R^4} s_{34}',$$

vom găsi că axa de încovoiere este paralelă cu vectorul $s_{35}' \boldsymbol{m} + s_{34}' \boldsymbol{n}$, valoarea ei absolută fiind egală cu

$$\psi = \frac{2K}{\pi R^4} \sqrt{(s_{35}')^2 + (s_{34}')^2}\,.$$

Şi această expresie depinde numai de orientarea cristalografică a axei barei, adică de componentele q_i ale versorului său, $\boldsymbol{q}$. Într-un sistem de coordonate arbitrar, în particular, în sistemul de coordonate cristalofizic,

$$\psi = \frac{4K}{\pi R^4} \sqrt{\boldsymbol{qqq} \,\vdots\, \mathbf{s} \cdot (\mathbf{I} - \boldsymbol{qq}) \cdot \mathbf{s} \,\vdots\, \boldsymbol{qqq}}\,.$$

Suprafeţele modulului lui Young, $E(\boldsymbol{q})$, ale coeficienţilor de dilatare, $E^{-1}(\boldsymbol{q})$, de torsiune, $G^{-1}(\boldsymbol{q})$ şi ai lui Poisson, $\nu(\boldsymbol{q})$, pentru o serie de cristale, sînt reprezentate în unele figuri din § 24 şi în figurile 54.3 — 54.10. Pentru cristalele din sistemul cubic, suprafeţele sînt date în figurile 24.4, a şi b şi 24.7. Dacă tensorul deformabilităţii elastice, **s**, pentru cristalele din sistemul cubic este scris sub forma (52.13), atunci ecuaţiile suprafeţelor $E^{-1}(\boldsymbol{q})$ şi $G^{-1}(\boldsymbol{q})$ capătă forma

$$r = E^{-1}(\boldsymbol{q}) = S_I^{\{4\}} + S_N\, N_{ijkl}^0\, q_i\, q_j\, q_k\, q_l, \tag{54.22}$$

$$r = G^{-1}(\boldsymbol{q}) = \frac{4}{3}\,(S_I^{\{4\}} - S_I^{\{22\}}) - 2S_N^{\{4\}}\, N_{ijkl}^0\, q_i\, q_j\, q_k\, q_l, \tag{54.23}$$

în care coeficienţii S sînt daţi de formulele (52.15), iar nonorul $\mathbf{N}^0$, de formula (52.14). Astfel, razele vectoare ale acestor suprafeţe constau dintr-un termen constant (în (54.22) $S_I^{\{4\}}$) şi componenta normală a nonorului $\mathbf{N}^0[m3m]$, înmulţită cu un anumit coeficient (în (54.22) este $S_N^{\{4\}}$). Se poate spune că suprafeţele (54.22) şi (54.23) sînt combinaţii liniare ale suprafeţelor scalarului unitate (sfere de rază $r = 1$) şi a nonorului $\mathbf{N}^0[m3m]$ (v. figura 47.5). Prin urmare, suprafaţa reprezentată în figura 47.5 este o suprafaţă universală de anizotropie a proprietăţilor elastice ale tuturor cristalelor cubice. Ea arată, în particular, că planurile {111} sînt planuri izotrope pentru ele, iar direcţiile ⟨100⟩ şi ⟨111⟩ sînt extremale.

Suprafețele $E^{-1}(\boldsymbol{q})$ și $G^{-1}(\boldsymbol{q})$, pentru cristalele transversal-izotrope din punct de vedere elastic, sînt reprezentate în figura 24.6. Dacă tensorul s se scrie în forma (52.9) ecuațiile lor se pot scrie astfel

$$r = E^{-1}(\boldsymbol{q}) = S_I^{\{4\}} + S_D^{\{4\}} D_{ij}^0 q_i q_j + S_N^{\{4\}} N_{ijkl}^0 q_i q_j q_k q_l, \quad (54.24)$$

$$r = G^{-1}(\boldsymbol{q}) = \frac{4}{3}(S_I^{\{4\}} - S_I^{\{22\}}) + \frac{1}{3}(S_D^{\{4\}} - S_D^{\{22\}})D_{ij}^0 q_i q_j - -2S_N^{\{4\}} N_{ijkl}^0 q_i q_j q_k q_l, \quad (54.25)$$

în care $\mathbf{D}^0$ și $\mathbf{N}^0$ sînt dați de formulele (52.10) și (52.11). Așadar, aceste suprafețe sînt combinații liniare între o sferă și suprafețele tensorilor $\mathbf{D}^0[\infty/mm]$ și $\mathbf{N}^0[\infty/mm]$ (fig. 47.1, *b* și *d*). Coeficienții dezvoltării caracterizează rolul pe care îl are fiecare dintre ceilalți tensori ireductibili la formarea suprafeței.

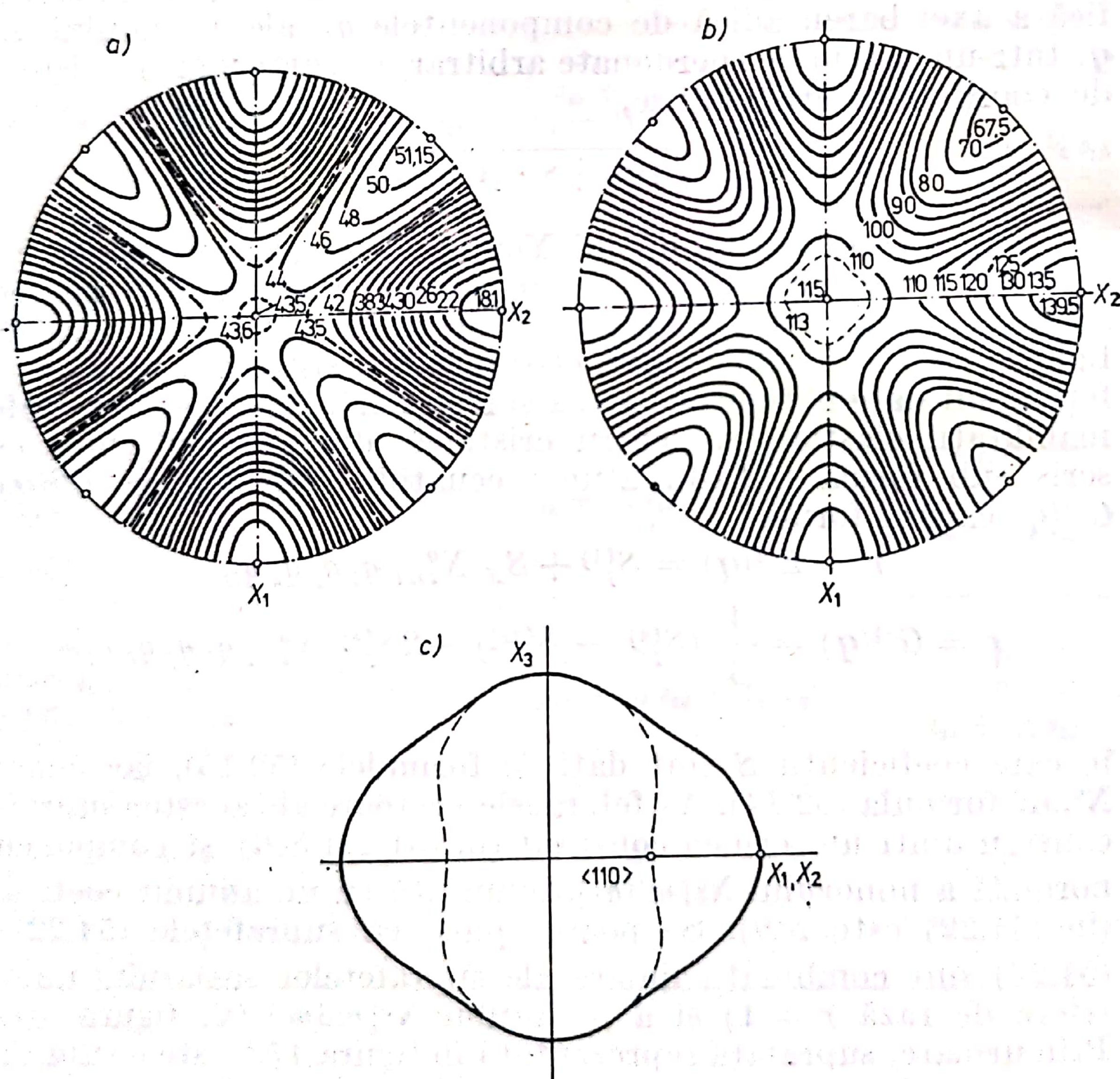


Fig. 54.3. Suprafețele proprietăților elastice pentru un cristal de dihidrofosfat de amoniu (ADP), clasa $\overline{4}2\,m$: *a*) $E^{-1}(\boldsymbol{q})$, proiecție stereografică; *b*) $G^{-1}(\boldsymbol{q})$, proiecție stereografică; în 10^{-13} cm²/dyn; c) $G^{-1}(\boldsymbol{q})$, secțiuni. Simetria suprafețelor este $4/mmm$.

În figurile 54.3 — 54.5 sînt date proiecţiile stereografice şi secţiunile suprafeţelor proprietăţilor elastice ale cristalelor din sistemul tetragonal. Aceste suprafeţe pot fi puse sub formă de combinaţii liniare între o sferă şi suprafeţele $\mathbf{D}^0[\infty/mm]$, $\mathbf{N}^0[\infty/mm]$ şi $\mathbf{N}^0[m3m]$. După cum se vede din figura 54.5, şi cristalele din clasa Laue $4/m$ au simetria proprietăţilor elastice tot $4/mmm$, numai că planurile de simetrie ale proprietăţilor elastice nu sînt, la ele, legate de reperul cristalofizic.

Suprafeţele $E^{-1}(\mathbf{q})$ şi $G^{-1}(\mathbf{q})$ ale cristalelor din sistemul trigonal (figurile 24.8 — 24.11, 54.6 şi 54.7) sînt tot combinaţii liniare

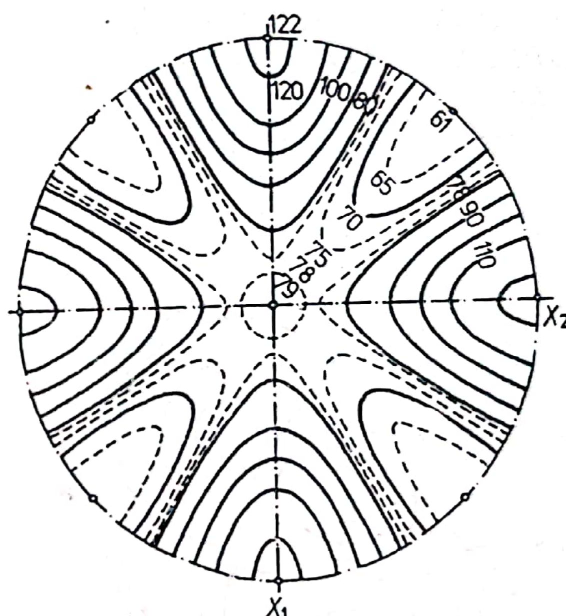


Fig. 54.4. Proiecţia stereografică a suprafeţei coeficientului de torsiune, $G^{-1}(\mathbf{q})$, a unui cristal de dihidrofosfat de potasiu (KDP), clasa $\bar{4}2m$. Simetria suprafeţei este $4/mmm$. În 10^{-13} cm²/dyn.

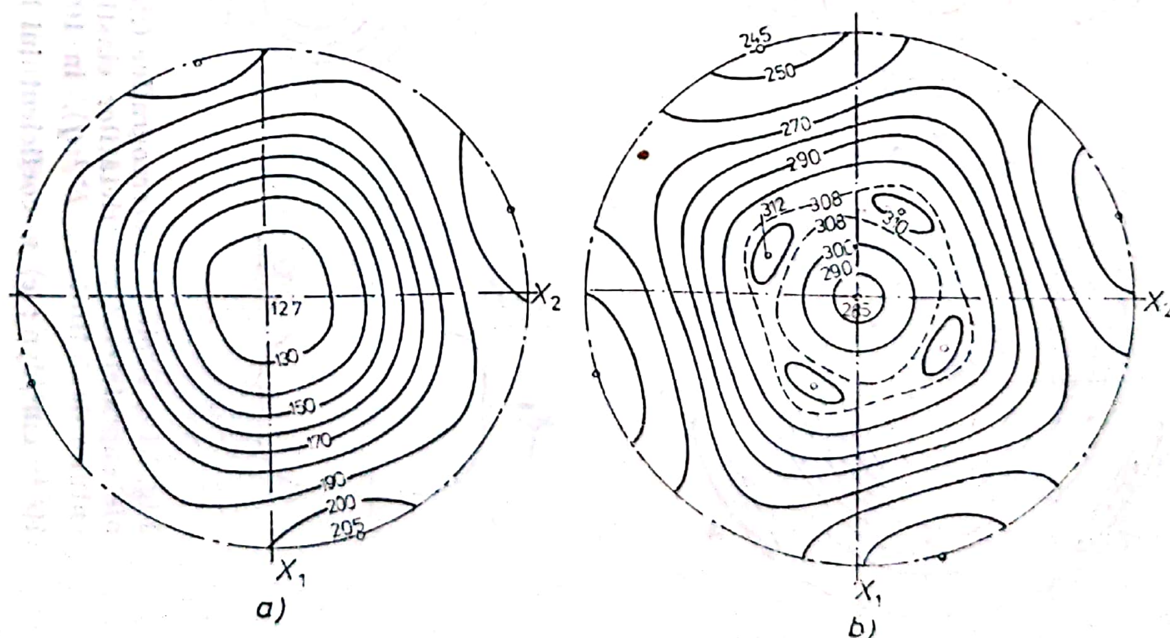


Fig. 54.5. Proiecţiile stereografice ale suprafeţelor: *a*) coeficientului de întindere, $E^{-1}(\mathbf{q})$; *b*) coeficientului de torsiune, $G^{-1}(\mathbf{q})$ ale cristalului de pentaeritrit, clasa $\bar{4}$, clasa Laue $4/m$. Simetria suprafeţelor este $4/mmm$. În 10^{-13} cm²/dyn.

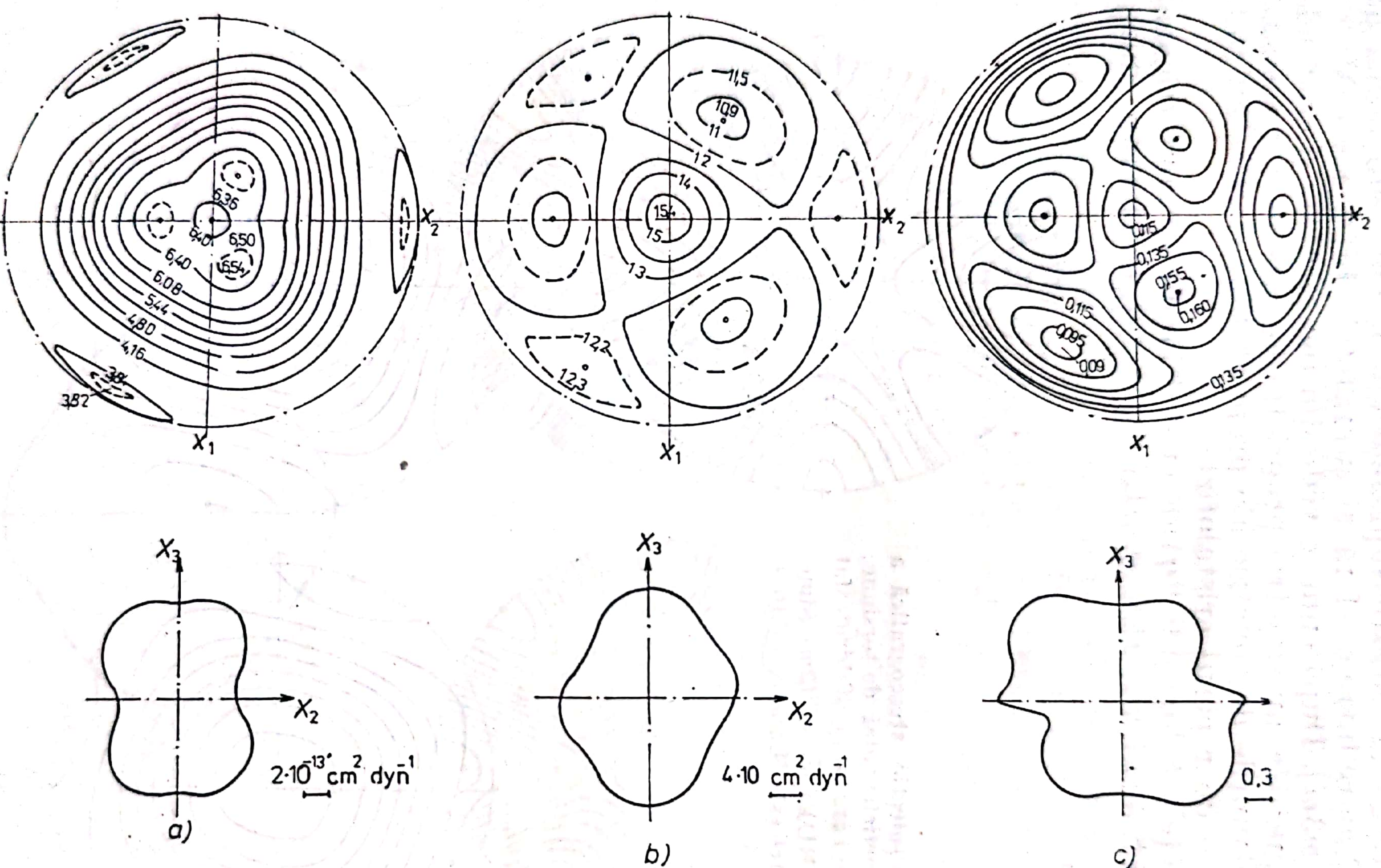


Fig. 54.6. Proiecţiile stereografice (rîndul de sus) şi secţiunile cu planul X_2X_3 (rîndul de jos) ale suprafeţelor proprietăţilor elastice pentru cristalul de turmalină, clasa $3m$: *a*) a coeficientului de întindere, $E^{-1}(\boldsymbol{q})$, în 10^{-13} cm²/dyn; *b*) a coeficientului de torsiune, $G^{-1}(\boldsymbol{q})$, în 10^{-13} cm²/dyn; *c*) a coeficientului Poisson $\nu(\boldsymbol{q})$. Simetria suprafeţelor este $\bar{3}m$. Planul X_1X_2 este izotrop.

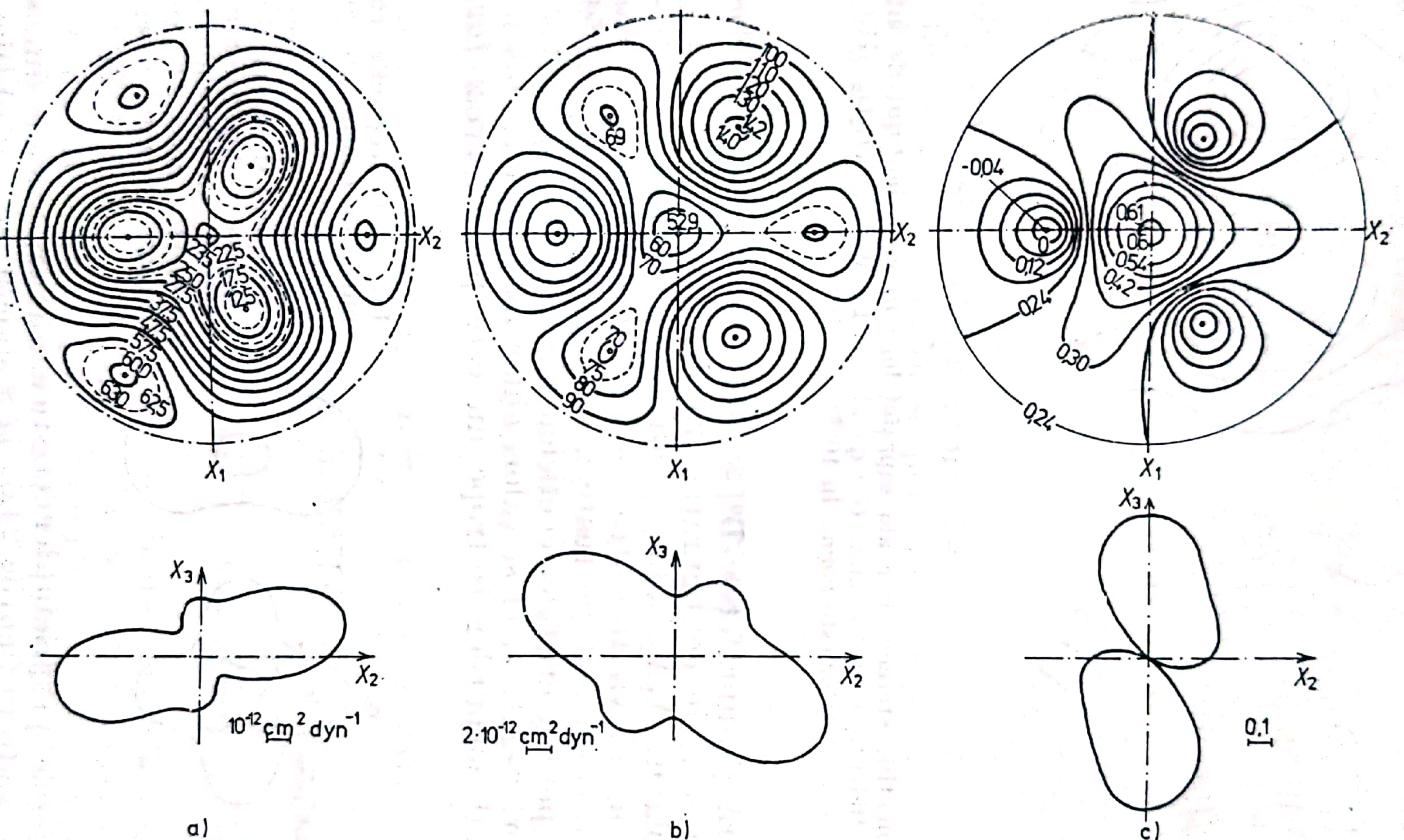


Fig. 54.7. Proiecţiile stereografice (rîndul de sus) şi secţiunile cu planul X_2X_3 (rîndul de jos) ale suprafeţelor proprietăţilor elastice pentru cristalul de telur, clasa 32 : *a*) a coeficientului de întindere, $E^{-1}(\boldsymbol{q})$; în 10^{-13} cm²/dyn ; *b*) a coeficientului de torsiune, $G^{-1}(\boldsymbol{q})$; în 10^{-13} cm²/dyn ; *c*) a coeficientului Poisson, $\nu(\boldsymbol{q})$. Simetria suprafeţelor este $\bar{3}m$. Planul X_1X_2 este izotrop.

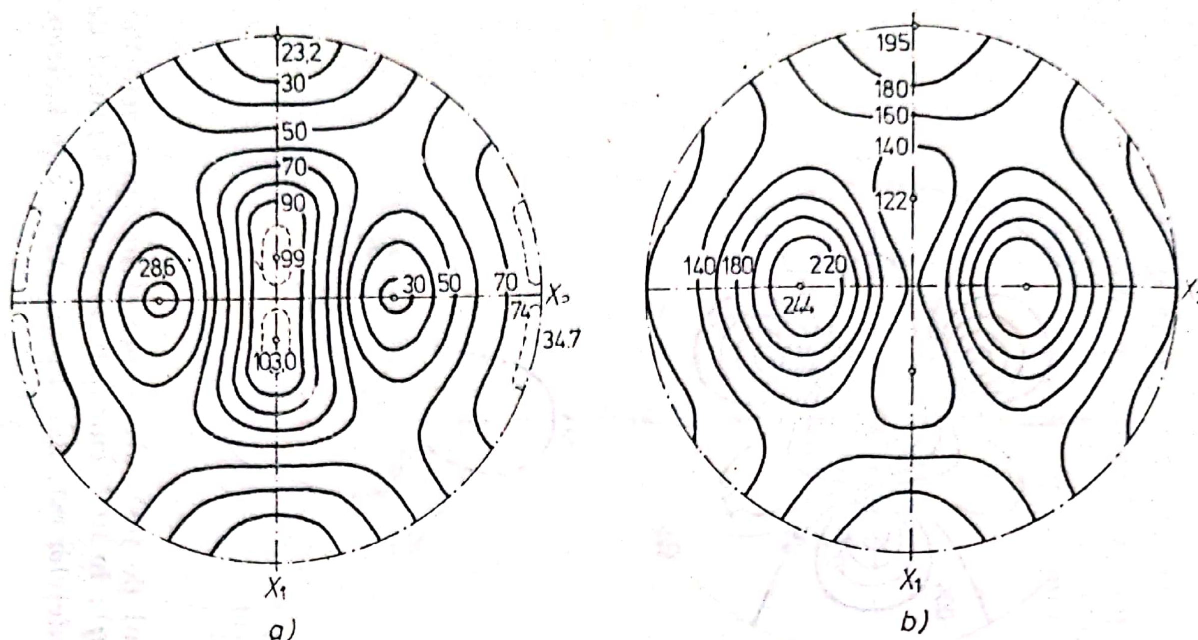


Fig. 54.8. Proiecțiile stereografice ale suprafețelor: *a*) coeficientului de întindere $E^{-1}(\boldsymbol{q})$; *b*) coeficientului de torsiune $G^{-1}(\boldsymbol{q})$ ale cristalului de $KB_5O_8 \cdot 4H_2O$ clasa *mm*2; simetria suprafețelor este *mmm*. În 10^{-13} cm²/dyn.

între o sferă și suprafețele $\mathbf{D}^0[\infty/mm]$, $\mathbf{N}^0[\infty/mm]$ și $\mathbf{N}^0[m3m]$, dar aceasta se ia în configurație „romboedrică" (v. fig. 47,5, *b*). Deoarece planul X_1X_2, adică (0001), este izotrop pentru toate componentele, el va fi izotrop și pentru proprietățile elastice, ceea ce este confirmat de toate aceste figuri. În figura 54.7, *c* se vede că pentru cristale, coeficientul Poisson, $\nu(\boldsymbol{q})$, capătă nu numai valori negative, ci și valori chiar mai mari ca 0,05, ceea ce, în cazul corpurilor izotrope nu este posibil (vezi formula (63.23)).

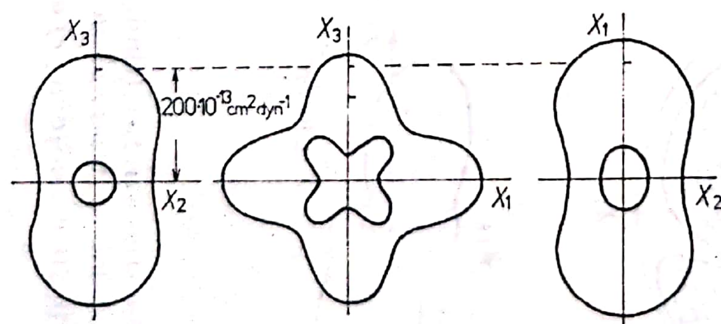
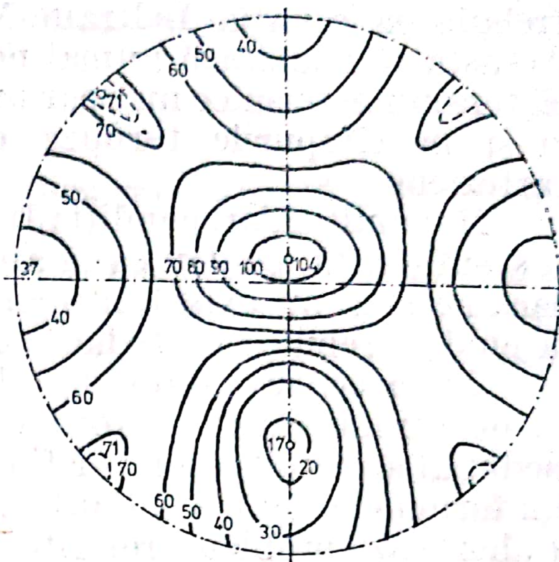


Fig. 54.9. Secțiunile cu planurile de coordonate ale suprafețelor coeficientului de întindere, $E^{-1}(\boldsymbol{q})$ (suprafața interioară) și coeficientului de torsiune, $G^{-1}(\boldsymbol{q})$ (suprafața exterioară) ale cristalului de sare Seignette, clasa 222. Simetria suprafețelor este *mmm* (Wooster, 1949).

Suprafețele proprietăților elastice ale cristalelor din sistemul rombic, date în figurile 24.5, 54.8 și 54.9, se pot obține prin combinarea liniară a setului pentru cristalele tetragonale, completată cu figura 47.6. În sfîrșit, în figura 54.10 este reprezentată suprafața $E^{-1}(\boldsymbol{q})$ pentru un cristal din sistemul monoclinic.

Fig. 54.10. Proiecţia stereografică a suprafeţei coeficientului de întindere, $E^{-1}(q)$, al cristalului de etilendiamintartrat (EDT), clasa 2. Simetria suprafeţei este $2/m$. În 10^{-13} cm^2/dyn.



Ecuaţiile suprafeţelor proprietăţilor elastice, în particular ecuaţiile (54.22) — (54.25), se pot obţine folosind metoda combinării liniare a ecuaţiilor suprafeţelor tensorilor unitari ireductibili, cuprinşi în tabelul 47.4.

§ 55. TENSIUNILE TERMICE DIN CRISTALE

Ecuaţiile echilibrului elastic, Div $\boldsymbol{\sigma} = 0$, şi cele de compatibilitate a deformărilor, Ink $\boldsymbol{\varepsilon} = 0$, sînt adevărate indiferent dacă întregul cristal se află la aceeaşi temperatură, sau dacă temperatura variază de la un punct la altul. În cel de al doilea caz însă va fi necesar ca în legea lui Hooke să fie incluşi termenii ce depind de temperatură,

$$\varepsilon_\lambda = s_{\lambda\mu}\ \sigma_\mu + \alpha_\lambda\ \Theta, \qquad \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\alpha}\Theta. \tag{55.1}$$

Drept urmare, ecuaţia Beltrami-Mitchell devine neomogenă : în locul relaţiei (51.17) obţinem

$$\text{Ink}\ (\mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}) = -\ \text{Ink}\ (\boldsymbol{\alpha}\ \Theta). \tag{55.2}$$

În cîmpuri termice omogene, toate corpurile omogene, fie că sînt fie că nu sînt izotrope, se dilată complet liber, dacă acestei dilatări nu i se opun corpurile înconjurătoare. În cîmpuri termice neomogene unele părţi ale corpului împiedică dilatarea liberă a celorlalte părţi ale corpului, ceea ce provoacă apariţia tensiunilor termice într-un corp omogen a cărui suprafaţă nu este supusă la nici un fel de sarcini. Teorema univocităţii soluţiei ecuaţiilor teoriei elasticităţii arată că pentru apariţia tensiunilor termice

trebuie ca ecuaţia Beltrami-Mitchell, (55.2), să fie neomogenă. Aceasta se realizează numai pentru Ink$(\alpha\,\Theta) \neq 0$; de aici rezultă că tensiunile termice nu apar numai în cîmpurile termice omogene, ci şi în cîmpurile termice care depind liniar de coordonatele carteziene.

Mai mult chiar, condiţia Ink $(\alpha\Theta) \neq 0$ nu este numai necesară, ci şi suficientă, pentru ca să apară tensiunile termice. Într-adevăr dacă acestea nu există, atunci tensorul deformărilor este $\varepsilon = \alpha\Theta$, pe cînd el trebuie să satisfacă ecuaţia de compatibilitate Ink $\varepsilon = 0$.

Deoarece suprafaţa cristalului este liberă, neexistînd nici un fel de sarcini, atît tensorul tensiunilor termice cît şi momentul mediu al acestui tensor vor fi egali cu zero, ceea ce rezultă direct din formulele (50.15) şi (50.16). Acest fapt este deseori folosit cînd se abordează probleme referitoare la distribuţia tensiunilor termice.

Aici vom examina una dintre cele mai simple probleme de acest gen, şi anume problema tensiunilor termice într-o lamelă cristalină de grosime $2a$, a cărei temperatură variază numai cu grosimea (Indenbom, Silvestrova, Sirotin, 1956).

Să introducem un sistem cartezian de coordonate, $OX_1'X_2'X_3'$, cu originea în planul mediu al lamelei. Fie ca axele rectangulare X_1' şi X_2' să se afle în planul mediu al lamelei, iar axa X_3' să fie orientată după normala la lamelă. Este evident că nu numai temperatura, dar nici deformările şi nici tensiunile nu vor depinde nici de x_1', nici de x_2'.

Ecuaţiile echilibrului elastic au deci forma

$$\frac{\mathrm{d}\,\sigma_{i3}'}{\mathrm{d}x_3'} = 0 \tag{55.3}$$

(prin accent se notează faptul că componentele tensorului σ sînt raportate la sistemul $X_1'X_2'X_3'$). Soluţiile lor, σ_{i3}', sînt nişte constante, toate fiind egale cu zero, deoarece, conform relaţiei (50.15),

$$\langle \sigma_{i3}' \rangle = \frac{1}{2a}\int_{-a}^{a} \sigma_{i3}'\,\mathrm{d}x_3' = 0.$$

Aşadar,

$$\sigma_3' = \sigma_4' = \sigma_5' = 0, \tag{55.4}$$

astfel încît diferite de zero sînt numai trei dintre componente, σ_1', σ_2' şi σ_6'.

Din ecuaţiile de compatibilitate, aşa cum s-a arătat în § 49 (formulele (49.20)), rezultă că

$$\varepsilon_\lambda' = A_\lambda' + x_3'\,B_\lambda' \qquad (\lambda = 1,\ 2,\ 6), \tag{55.5}$$

A_λ' şi B_λ' fiind numere ce nu depind de x_3'.

Ţinînd cont de (55.4), legea Hooke (55.1) poate fi scrisă sub forma

$$A'_\lambda + x'_3\, B'_\lambda = s'_{\lambda\mu}\, \sigma'_\mu + \alpha'_\lambda\, \Theta \qquad (\lambda,\mu = 1,\ 2,\ 6) \qquad (55.6)$$

(celelalte trei egalităţi, care intră în legea generalizată a lui Hooke nu interesează).

Să mediem egalitatea (55.6) pe întreaga lamelă, adică să integrăm ambele părţi ale ei în raport cu x'_3, de la $-a$ la a, iar rezultatul să-l împărţim la $2a$. Ţinînd cont de faptul că tensorul tensiunilor, mediat, este egal cu zero, obţinem

$$A'_\lambda = \alpha'_\lambda \langle\Theta\rangle \qquad (\lambda = 1,\ 2,\ 6). \qquad (55.7)$$

Înmulţim acum ambele părţi ale egalităţii (55.6) cu x'_3 şi efectuăm din nou medierea după întreaga lamelă. Folosind faptul că şi momentul tensorului tensiunilor, mediat, este egal cu zero, obţinem

$$B'_\lambda = \frac{3}{a^2}\, \alpha'_\lambda \langle x'_3\, \Theta\rangle \qquad (\lambda = 1, 2, 6). \qquad (55.8)$$

Prin urmare, am găsit cele trei componente ale tensorului deformărilor

$$\varepsilon'_\lambda = \alpha'_\lambda \left((\langle\Theta\rangle + \frac{3}{a^2} x'_3 \langle x'_3\Theta\rangle \right) \qquad (\lambda = 1,\ 2,\ 6) \qquad (55.9)$$

Cele trei egalităţi (55.6), transcrise în forma

$$s'_{\lambda\mu}\, \sigma'_\mu = \alpha'_\lambda \left(\langle\Theta\rangle + \frac{3}{a^2}\, x'_3\, \langle x'_3\, \Theta\rangle - \Theta \right) \quad (\lambda,\mu = 1,2,6) \qquad (55.10)$$

pot fi considerate drept un sistem de trei ecuaţii liniare în cele trei componente necunoscute ale tensorului tensiunilor, σ'_1, σ'_2, σ'_6. Acest sistem se rezolvă uşor, dacă ştim matricea $d'_{\varkappa\lambda}$, care este inversa matricei $s'_{\lambda\mu}$:

$$d'_{\varkappa\lambda}\, s'_{\lambda\mu} = \delta_{\varkappa\mu} \qquad (\varkappa,\ \lambda,\ \mu = 1,\ 2,\ 6). \qquad (55.11)$$

Cîmpul tensiunilor este dat de formulele

$$\sigma'_\varkappa = \begin{cases} d'_{\varkappa\lambda}\, \alpha'_\lambda \left(\langle\Theta\rangle + \dfrac{3}{a^2}\, x'_3\, \langle x'_3\, \Theta\rangle - \Theta \right) & (\varkappa,\ \lambda = 1,\ 2\ ,6), \\ 0 & (\varkappa = 3,\ 4,\ 5). \end{cases} \qquad (55.12)$$

De aici, folosindu-ne de legea Hooke, (55.1), se pot obţine şi cele trei componente ale tensorului deformărilor rămase încă nedeterminate.

Dacă cîmpul termic este simetric în raport cu planul mediu al lamelei : $\Theta(-x_3') = \Theta(x_3')$, atunci momentul său mediu, $\langle x_3' \Theta \rangle$, se anulează, astfel încît în loc de (55.12) avem

$$\sigma_\varkappa' = \begin{cases} d_{\varkappa\lambda}' \, \alpha_\lambda' \, (\langle\Theta\rangle - \Theta) & (\varkappa, \lambda = 1, 2, 6), \\ 0 & (\varkappa = 3, 4, 5). \end{cases} \tag{55.13}$$

Un cîmp termic simetric în raport cu planul mediu al lamelei se obţine, în particular, la o încălzire uniformă a lamelei (v. § 33). În notaţiile acestui paragraf, formula dedusă acolo, (33.12), ia forma

$$\Theta - \langle\Theta\rangle = \frac{ha^2}{6k_3'}\left[3\left(\frac{x_3'}{a}\right)^2 - 1\right], \tag{55.14}$$

unde h este viteza de creştere a temperaturii, $k_3' = k_{33}'$ sînt componentele tensorului conductibilităţii termice în sistemul $X_1'X_2'X_3'$, iar a este semigrosimea lamelei. Prin urmare, în cazul unei încălziri uniforme a peliculei cristaline, în ea apar tensiuni termoelastice

$$\sigma_\varkappa' = \begin{cases} \dfrac{d_{\varkappa\lambda}' \, \alpha_\lambda' \, ha^2}{6k_3'}\left[1 - 3\left(\dfrac{x_3'}{a}\right)^2\right] & (\varkappa, \lambda = 1, 2, 6), \\ 0 & (\varkappa = 3, 4, 5). \end{cases} \tag{55.15}$$

Prin încălzire lamela este de obicei comprimată dinspre margini acolo tensiunile fiind egale cu

$$\sigma_\varkappa'(\pm a) = -\frac{d_{\varkappa\lambda}' \, \alpha_\lambda' \, h \, a^2}{3k_3'}$$

şi întinsă la mijloc ; în planul mediu al lamelei tensiunile sînt

$$\sigma_\varkappa'(0) = \frac{d_{\varkappa\lambda}' \, \alpha_\lambda' \, ha^2}{6k_3'} .$$

Prin răcirea peliculei $h < 0$, deci toate tensiunile vor fi contrare celor care apar la încălzire (este rezolvată şi problema tensiunilor termice care apar la încălzirea uniformă a unor cilindri cristalini ; vezi Sirotin, 1965).

Coeficienţii $\gamma_\varkappa' = d_{\varkappa\lambda}' \alpha_\lambda'$ pentru lamelele cristaline de diverse orientări sînt cuprinşi în tabelul 55.1. Ca dimensiune, şi chiar ca ordin de mărime, ei coincid cu coeficienţii termoelasticităţii, (v.

Tabelul 55.1

Coeficienţii termoelastici, $\gamma'_{\varkappa}$, pentru lamele cristaline

Sistemele şi clasele	Orientările lamelelor şi alegerea axelor X'_1 şi X'_2	Coeficienţii $\gamma'_{\varkappa}$
Sistemul triclinic	$X'_3 \parallel X_3 \perp (001)$ $X'_1 \parallel X_1$ $X'_2 \parallel X_2$	$\gamma'_1 = A_1\, [(s_{22}s_{26} - s^2_{26})\,\alpha_1 + (s_{16}s_{26} - s_{66}s_{12})\,\alpha_2 + (s_{12}s_{26} - s_{22}s_{16})\,\alpha_6],$ $\gamma'_2 = A_1\, [(s_{16}s_{26} - s_{12}s_{66})\,\alpha_1 + (s_{11}s_{66} - s^2_{16})\,\alpha_2 + (s_{12}s_{16} - s_{11}s_{26})\alpha_6],$ $\gamma^1_6 = A_1\, [(s_{12}s_{26} - s_{22}s_{16})\,\alpha_1 + (s_{12}s_{16} - s_{11}s_{26})\,\alpha_2 + (s_{11}s_{22} - s^2_{12})\alpha_6]\,;$ $1/A_1 = s_{11}s_{22}s_{66} + 2s_{12}s_{16}s_{26} - s_{11}s^2_{26} - s_{22}s^2_{16} - s_{66}s^2_{12}.$
	$X'_3 \parallel X_1$ $X'_1 \parallel X_3$ $X'_2 \parallel X_2$	$\gamma'_1 = A_2\, [(s_{22}s_{44} - s^2_{24})\,\alpha_3 + (s_{24}\,s_{34} - s_{44}s_{23})\,\alpha_2 + (s_{23}s_{24} - s_{22}s_{34})\,\alpha_4],$ $\gamma'_2 = A_2\, [(s_{24}s_{34} - s_{44}s_{23})\,\alpha_3 + (s_{33}s_{44} - s^2_{34})\,\alpha_2 + (s_{23}s_{34} - s_{33}s_{24})\,\alpha_4],$ $\gamma'_6 = A_2\, [(s_{23}s_{24} - s_{22}s_{34})\,\alpha_3 + (s_{23}s_{34} - s_{33}s_{24})\,\alpha_2 + (s_{22}s_{33}s^2_{23})\,\alpha_4]\,;$ $1/A_2 = s_{22}s_{33}s_{44} + 2s_{23}s_{34}s_{24} - s_{22}s^2_{34} - s_{33}s^2_{24} - s_{44} - s^2_{23}.$
	$X'_3 \parallel X_2$ $X'_1 \parallel X_1$ $X'_2 \parallel X_3$	$\gamma'_1 = A_3\, [(s_{33}s_{55} - s^2_{35})\,\alpha_1 + (s_{15}s_{35} - s_{55}s_{13})\,\alpha_3 + (s_{15}s_{35} - s_{33}s_{15})\,\alpha_5],$ $\gamma'_2 = A_3\, [(s_{15}s_{35} - s_{55}s_{13})\,\alpha_1 + (s_{11}s_{55} - s^2_{15})\,\alpha_3 + (s_{13}s_{15} - s_{11}s_{35})\,\alpha_5)],$ $\gamma'_6 = A_3\, [(s_{13}s_{35} - s_{33}s_{15})\,\alpha_1 + (s_{13}s_{15} - s_{11}s_{35})\,\alpha_3 + (s_{11}s_{33} - s^2_{13})\,\alpha_5]\,;$ $1/A_3 = s_{11}s_{33}s_{55} + 2s_{13}s_{15}s_{35} - s_{11}s^2_{35} - s_{33}s^2_{15} - s_{55}s^2_{13}.$
Sistemul monoclinic	$X'_3 \parallel X_2 \perp (010)$ $X'_2 \parallel X_3 \parallel [001]$	$\gamma'_1 = A_3\, [(s_{11}s_{55} - s^2_{15})\,\alpha_3 + (s_{35}s_{15} - s_{55}s_{31})\,\alpha_1 + (s_{31}s_{15} - s_{11}s_{35})\,\alpha_5],$ $\gamma'_2 = A_3\, [(s_{35}s_{15} - s_{55}s_{31})\,\alpha_3 + (s_{33}s_{55} - s^2_{35})\,\alpha_1 + (s_{31}s_{35} - s_{33}s_{15})\,\alpha_5].$ $\gamma'_6 = A_3\, [(s_{31}s_{15} - s_{11}s_{35})\,\alpha_3 + (s_{31}s_{35} - s_{33}s_{15})\,\alpha_1 + (s_{33}s_{11} - s^2_{31})\,\alpha_5].$
	$X'_3 \parallel X_3 \parallel [001]$ $X'_2 \parallel X_2 \parallel [010]$	$\gamma'_1 = A_4\,(s_{22}\alpha_1 - s_{12}\alpha_2),\quad \gamma'_2 = A_4\,(-s_{12}\alpha_1 + s_{11}\alpha_2),\quad \gamma'_6 = 0.$ $1/A_4 = s_{11}s_{22} - s^2_{12}.$

Sistemele și clasele	Orientările lamelelor și alegerea axelor X_1' și X_2'	Coeficienții $\gamma_\varkappa'$
Sistemul monoclinic	$X_3' \perp (001)$ $X_2' \parallel X_2 \parallel [010]$ $\varphi = \beta - 90°$	$\gamma_1' = A_5\,[(s_{22}\alpha_1 - s_{12}\alpha_2)\cos^2\varphi + (s_{22}\alpha_3 - s_{23}\alpha_2)\sin^2\varphi - (s_{22}\alpha_5 - s_{25}\alpha_2)\sin\varphi\cos\varphi]$, $\gamma_2' = A_5\,\{(s_{11}\alpha_2 - s_{12}\alpha_1)\cos^4\varphi + (s_{33}\alpha_2 - s_{23}\alpha_3)\sin^4\varphi +$ $+ [(2s_{31} + s_{55})\,\alpha_2 - s_{23}\alpha_1 - s_{12}\alpha_3 - s_{25}\alpha_5]\sin^2\varphi\cos^2\varphi + (s_{25}\alpha_1 - s_{15}\alpha_2 +$ $+ s_{12}\alpha_5)\cos^3\varphi\sin\varphi + (-s_{35}\alpha_2 + s_{25}\alpha_3 + s_{23}\alpha_5)\cos\varphi\sin^3\varphi\}$, $\gamma_6' = 0$; $1/A_5 = (s_{11}s_{22} - s_{12}^2)\cos^4\varphi + (s_{22}s_{33} - s_{23}^2)\sin^4\varphi +$ $+ (2s_{22}s_{31} - 2s_{12}s_{23} + s_{22}s_{55} - s_{25}^2)\cos^2\varphi\sin^2\varphi -$ $- [(s_{22}s_{15} - s_{12}s_{25})\cos^2\varphi + (s_{22}s_{35} - s_{23}s_{25})\sin^2\varphi]\sin 2\varphi$.
Sistemul rombic	$X_3' \parallel X_3 \perp (001)$ $X_1' \parallel X_1 \parallel [100]$	$\gamma_1' = A_4\,(s_{22}\alpha_1 - s_{12}\alpha_2)$, $\gamma_2' = A_4\,(-s_{12}\alpha_1 + s_{11}\alpha_2)$, $\gamma_6' = 0$; $1/A_4 = s_{11}\,s_{22} - s_{12}^2$.
	$X_3' \perp (h0l)$ $X_2' \parallel X_2 \parallel [010]$	$\gamma_1' = A_6\,[h^2(c/a)^2 + l^2]\,[l^2\,(s_{22}\alpha_1 - s_{12}\alpha_2) + h^2(c/a)^2\,(s_{22}\alpha_3 - s_{23}\alpha_2)]$, $\gamma_2' = A_6\,\{l^4\,(s_{11}\alpha_2 - s_{12}\alpha_1) + h^4\,(c/a)^4\,(s_{33}\alpha_2 - s_{23}\alpha_3) -$ $- h^2l^2\,(c/a)^2\,[s_{23}\alpha_1 + s_{12}\alpha_3 - (2s_{31} + s_{55})\,\alpha_2]\}$, $\gamma_6' = 0$; $1/A_6 = l^4\,(s_{11}s_{22} - s_{12}^2) + h^4\,(c/a)^4\,(s_{32}s_{33} - s_{23}^2) + h^2l^2\,(c/a)^2\,(2s_{22}s_{31} - 2s_{12}s_{23} + s_{22}s_{55})$.
Sistemul trigonal	$X_3' \parallel X_3 \perp (0001)$	$\gamma_1' = \gamma_2' = \alpha_1/(s_{11} + s_{12})$. $\gamma_6' = 0$.
toate clasele	$X_3' \parallel X_1 \perp (2\bar{1}\bar{1}0)$ $X_1' \parallel X_3 \parallel [0001]$ $X_2' \parallel X_2 \parallel [01\bar{1}0]$	$\gamma_1' = A_7[-\,s_{44}s_{13}\alpha_1 + (s_{11}s_{44} - s_{14}^2)\,\alpha_3]$, $\gamma_2' = A_7\,(s_{33}s_{44}\alpha_1 - s_{44}s_{13}\alpha_3)$, $\gamma_6' = A_7\,s_{14}\,(s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3)$; $1/A_7 = s_{44}(s_{11}s_{33} - s_{13}^2) - s_{33}s_{14}^2$.
clasele 3 și $\bar{3}$	$X_3' \parallel X_2 \perp (01\bar{1}0)$ $X_1' \parallel X_1 \parallel [2\bar{1}\bar{1}0]$ $X_2' \parallel X_3 \parallel [0001]$	$\gamma_1' = A_8s_{44}\,(s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3)$, $\gamma_2' = A_8[-s_{44}s_{13}\alpha_1 + (s_{11}s_{44} - s_{25}^2)\,\alpha_3]$, $\gamma_6' = A_8s_{25}(s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3)$; $1/A_8 = s_{44}(s_{11}s_{33} - s_{13}^2) - s_{33}s_{25}^2$.

clasele 32, $3m$, $\bar{3}m$	$X_3' \parallel X_2 \perp (01\bar{1}0)$ $X_1' \parallel X_1 \parallel [2\bar{1}\bar{1}0]$	$\gamma_1' = A_9\,(s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3),\quad \gamma_2' = A_9(-s_{13}\alpha_1 + s_{11}\alpha_3),\quad \gamma_6' = 0.$ $1/A_9 = s_{11}s_{33} - s_{13}^2.$
Sistemul hexagonal și texturile	$X_3' \parallel X_3 \perp (0001)$	$\gamma_1' = \gamma_2' = \alpha_1/(s_{11} + s_{12}),\quad \gamma_6' = 0.$
	$X_3' \perp X_3$ $X_1' \perp X_3$, $X_2' \parallel X_3$	$\gamma_1' = A_9\,(s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3),\quad \gamma_2' = A_9\,(-s_{13}\alpha_1 + s_{11}\alpha_3),\quad \gamma_6' = 0.$ $1/A_9 = s_{11}s_{33} - s_{13}^2.$
Sistemul tetragonal	$X_3' \parallel X_3 \perp (001)$	$\gamma_1' = \gamma_2' = \alpha_1/(s_{11} + s_{12}),\quad \gamma_6' = 0.$
	$X_3' \parallel X_1 \perp (100)$ $X_1' \parallel X_2 \parallel [010]$	$\gamma_1' = A_9(s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_2),\quad \gamma_2' = A_9\,(-s_{13}\alpha_1 + s_{11}\alpha_3),\quad \gamma_6' = 0;$ $1/A_9 = s_{11}s_{33} - s_{13}^2.$
toate clasele	$X_3' \perp (110)$ $X_1' \parallel [1\bar{1}0]$ $X_2' \parallel X_3 \parallel [001]$	$\gamma_1' = 4A_{10}\,(s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3),\quad \gamma_2' = A_{10}[-4s_{13}\alpha_1 + (2s_{11} + 2s_{12} + s_{66})\,\alpha_3],\quad \gamma_6' = 0.$ $1/A_{10} = s_{33}\,(2s_{11} + 2s_{12} + s_{66}) - 4s_{13}^2.$
clasele 422, $4mm, \bar{4}2m,$ $4/mmm$	$X_3' \perp (h0l)$ $X_2' \parallel X_2 \parallel [010]$	$\gamma_1' = A_{11}[h^2(c/a)^2 + l^2]\,[l^2(s_{11} - s_{12})\,\alpha_1 + h^2(c/a)^2\,(s_{11}\alpha_3 - s_{13}\alpha_1)],$ $\gamma_2' = A_{11}\,\{l^4(s_{11} - s_{12})\,\alpha_1 + h^4(c/a)^4\,(s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3) +$ $+ h^2l^2\,(c/a)^2\,[(s_{13} + s_{44}]\,\alpha_1 - s_{12}\alpha_3]\},\quad \gamma_6' = 0.$ $1/A_{11} = l^4(s_{11}^2 - s_{12}^2) + h^4(c/a)^4(s_{11}s_{33} - s_{13}^2) + h^2l^2(c/a)^2(2s_{11}s_{13} - 2s_{12}s_{13} + s_{11}s_{44}).$
	$X_3' \perp (hhl)$ $X_2' \parallel [1\bar{1}0]$	$\gamma_1' = A_{12}[2h^2(c/a)^2 + l^2]\,\{l^2s_{66}\alpha_1 + h^2(c/a)^2\,[(2s_{11} + 2s_{12} + s_{66})\,\alpha_3 - 4s_{13}\alpha_1]\},$ $\gamma_2' = A_{12}\,\{l^4s_{66}\alpha_1 + 8h^4(c/a)^4\,(s_{33}\alpha_1 - s_{13}\alpha_3) +$ $+ h^2l^2(c/a)^2\,[4(s_{13} + s_{44})\,\alpha_1 - (2s_{11} + 2s_{12} - s_{66})\,\alpha_3]\},\quad \gamma_6' = 0;$ $1/A_{12} = l^4s_{66}\,(s_{11} + s_{12}) + 2h^4\,(c/a)^4\,(2s_{11}s_{33} + 2s_{12}s_{33} + s_{66}s_{33} - 4s_{13}^2) +$ $+ h^2l^2(c/a)^2\,(4s_{66}s_{13} + 2s_{11}s_{44} + 2s_{12}s_{44} + s_{66}s_{44}).$

Tabelul 55.1 (continuare)

Sistemele și clasele	Orientările lamelelor și alegerea axelor X_1' și X_2'	Coeficienții $\gamma_\varkappa'$
Sistemul cubic	$X_3' \perp (001)$	$\gamma_1' = \gamma_2' = \alpha/(s_{11} + s_{12})$, $\gamma_6' = 0$.
	$X_3' \perp (110)$ $X_1' \parallel [110], X_2' \parallel [001]$	$\gamma_1' = 4A_{13}(s_{11} - s_{12})\,\alpha$, $\gamma_2' = A_{13}\,(2s_{11} - 2s_{12} + s_{44})\,\alpha$, $\gamma_6' = 0$; $1/A_{13} = s_{11}\,(2s_{11} + 2s_{12} + s_{44}) - 4s_{12}^2$.
	$X_3' \perp (111)$	$\gamma_1' = \gamma_2' = 6\alpha/(4s_{11} + 8s_{12} + s_{44})$, $\gamma_6' = 0$.
	$X_3' \perp (h0l)$ $X_1' \parallel [010]$	$\gamma_1' = A_{14}(h^2 + l^2)^2\,(s_{11} - s_{12})\,\alpha$, $\gamma_2' = A_{14}\,[(h^4 + l^4)\,(s_{11} - s_{12}) + h^2l^2s_{44}]\alpha$, $\gamma_6' = 0$. $1/A_{14} = (h^4 + l^4)(s_{11}^2 - s_{12}^2) + h^2l^2\,(2s_{11}s_{12} - 2s_{12}^2 + s_{11}s_{44})$.
	$X_3' \perp (hhl)$ $X_1' \parallel [1\bar{1}0]$	$\gamma_1' = A_{15}(2h^2 + l^2)\,[l^2s_{44} + h^2\,(2s_{11} - 2s_{12} + s_{44})]\,\alpha$, $\gamma_2' = A_{15}\,[l^4s_{44} + 8h^4\,(s_{11} - s_{12}) + h^2l^2\,(5s_{44} - 2s_{11} + 2s_{12})]\,\alpha$, $\gamma_6' = 0$; $1/A_{15} = l^4\,(s_{11} + s_{12})\,s_{44} + 2h^4\,[(2s_{11} + 2s_{12} + s_{44})\,s_{11} - 4s_{12}^2] +$ $+ h^2l^2\,(2s_{11} + 6s_{12} + s_{44})\,s_{44}$.
Corpurile izotrope		$\gamma_1' = \gamma_2' = \alpha/(s_{11} + s_{12}) = \alpha E/(1 - \nu)$, $\gamma_6' = 0$.

Notațiile: a, c, β — parametrii rețelei cristaline, h, l — indicii Miller, E — modulul Young, ν — coeficientul lui Poisson.

§ 51), deosebindu-se însă ca valoare, dat fiind că coeficienţii $d'_{\varkappa\lambda}$ nu sînt egali cu coeficienţii $c'_{\varkappa\lambda}$. Cînd se utilizează acest tabel, trebuie avut în vedere faptul că coeficienţii $\gamma'_{\varkappa}$ sînt raportaţi la sistemul special de coordonate, $X'_1X'_2X'_3$, legat de lamelă; de aceea, ei sînt notaţi cu accent. Coeficienţii $s_{\lambda\mu}$ şi α_{λ} sînt raportaţi la un sistem de coordonate cristalofizic, ceea ce permite introducerea directă a valorilor lor tabelate în formulele scrise.

În general, relativ la termoelasticitatea corpurilor anizotrope trebuie consultată lucrarea lui Uzdalev (1957).

§ 56. UNDE ELASTICE ÎN CRISTALE

Propagarea undelor elastice (sonore şi ultrasonore) prin cristale prezintă o serie de particularităţi, care o deosebesc de propagarea prin corpurile izotrope. Aceste deosebiri amintesc, într-o anumită măsură, de deosebirile existente între propagarea luminii în cristale şi în corpurile izotrope.

O undă elastică plană (indiferent dacă este vorba despre cristal sau despre un mediu izotrop) este descrisă de vectorul de deplasare

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}, t) = A\,\boldsymbol{p}\,\exp\,(\mathrm{i}\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \mathrm{i}\omega t), \tag{56.1}$$

A fiind amplitudinea undei, $\boldsymbol{p}$ — vectorul polarizare, adică un vector unitar, care coincide ca direcţie cu vectorul deplasare, $\boldsymbol{k} = (2\pi/\lambda)\boldsymbol{m}$ — vectorul de undă, $\boldsymbol{v}$ — viteza de fază, iar $\boldsymbol{m}$ — vectorul unitar al normalei de undă. Deplasările reale sînt egale cu partea reală a acestei expresii complexe. Este convenabil ca expresia (56.1) să fie transcrisă în forma

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}, t) = A\boldsymbol{p}\,\exp\,[(2\pi\mathrm{i}/\lambda)\;(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r} - vt)]. \tag{56.2}$$

Cîmpul deplasărilor trebuie să satisfacă ecuaţiile electrodinamicii

$$c_{ijkl}\frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j\,\partial x_k} = \rho\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2},$$

unde c_{ijkl} sînt coeficienţii adiabatici de elasticitate ai cristalului, iar ρ — densitatea lui. Înlocuind expresia (56.2) în ecuaţia de mişcare şi observînd că diferenţierea în raport cu t a unor funcţii exponenţiale de forma (56.2) se reduce la înmulţirea cu $-(2\pi\mathrm{i}/\lambda)v$, iar diferenţierea în raport cu x_j, la înmulţirea cu $(2\pi\mathrm{i}/\lambda)m_j$, obţi-

nem ecuaţia fundamentală a teoriei undelor elastice din cristal, *ecuaţia lui Christoffel*

$$c_{ijkl}\, m_j\, m_k\, p_l = \rho\, v^2\, p_i. \tag{56.3}$$

Plecînd de la faptul că tensorul **c** are simetrie internă, vom introduce *tensorul* simetric al *lui Christoffel*

$$M_{il} = c_{ijkl}\, m_j\, m_k, \qquad \mathbf{M} = \boldsymbol{m} \cdot \mathbf{c} \cdot \boldsymbol{m}. \tag{56.4}$$

Deoarece tensorul **M** depinde nu numai de tensorul de material **c**, ci și de direcţia de propagare a undei, el nu este un tensor de material şi, deci, simetria sa exterioară poate lua şi valori mai mici decît simetria cristalului (lista formulelor de definiţie a tensorului Christoffel, pentru fiecare clasă de simetrie elastică, este dată în F. I. Fiodorov, 1965). Înlocuindu-l pe acesta în (56.3), obţinem ecuaţiile Christoffel în forma

$$M_{il}\, p_l = \rho\, v^2\, p_i, \quad \mathbf{M} \cdot \boldsymbol{p} = \rho\, v^2\, \boldsymbol{p}. \tag{56.5}$$

Deseori se foloseşte tensorul redus al coeficienţilor de elasticitate, $\lambda_{ijkl} = c_{ijkl}/\rho$, şi tensorul lui Christoffel redus, $\Lambda_{il} = \lambda_{ijkl}\, m_j\, m_k$. Ecuaţiile lui Christoffel capătă în acest caz forma

$$\Lambda_{il}\, p_l = v^2\, p_i. \tag{56.5'}$$

Ecuaţiile lui Christoffel arată că vectorii de polarizare, $\boldsymbol{p}$, ai undelor elastice, care se propagă într-un cristal după o direcţie $\boldsymbol{m}$, sînt vectori proprii ai tensorului lui Christoffel $\mathbf{M}(\boldsymbol{m})$ sau $\Lambda(\boldsymbol{m})$. Dacă tensorul Christoffel $\mathbf{M}(\boldsymbol{m})$ are trei valori proprii diferite, atunci, în direcţia dată, $\boldsymbol{m}$, se pot propaga trei unde elastice izonormale, perpendiculare între ele, astfel încît viteza de fază, $v_{(k)}$, a fiecăreia dintre ele să fie determinată de valorile proprii $\rho v^{2*}_{(k)}$, corespunzătoare vectorului propriu respectiv, $\boldsymbol{p}_{(k)}$ (pentru tensorul Christoffel redus, Λ_{il}, valorile proprii sînt egale cu pătratele vitezelor de fază, $v^2_{(k)}$). Faptul că printr-un cristal se pot propaga numai unde de o anumită polaritate strict determinată, înrudeşte acustica cristalelor cu optica cristalelor. Spre deosebire de undele electromagnetice, într-o anumită direcţie $\boldsymbol{m}$ se propagă trei unde elastice, nu două. Aceea dintre ele al cărei vector de polarizare

---

* Valorile proprii ale tensorilor Christoffel sînt pozitive pentru orice $\boldsymbol{m}$; aceasta este o consecinţă a inegalităţilor pe care le satisface tensorul **c**; v. §63. Demonstraţia faptului că valorile proprii ale tensorului Christoffel sînt pozitive este dată în lucrarea lui Hodorov, 1965.

face cel mai mic unghi cu vectorul normalei de undă se numește *undă cvasilongitudinală*, iar celelalte două, *unde cvasitransversale.* Se poate întîmpla ca vectorul de polarizare al uneia dintre cele trei unde să coincidă cu vectorul normalei de undă ; atunci această undă va fi longitudinală, celelalte două unde fiind obligatoriu transversale. O asemenea direcție $\boldsymbol{m}$ se numește *normală longitudinală*. Se poate întîmpla și ca numai una dintre cele trei unde să fie transversală ; în acest caz, unghiul dintre vectorul de polarizare al undei cvasilongitudinale și normala de undă este egal cu unghiul dintre vectorul de polarizare al undei cvasitransversale și planul frontului de undă. În acest caz, $\boldsymbol{m}$ este *normala transversală.*

Dacă două valori proprii ale tensorului $\mathbf{M}(\boldsymbol{m})$ coincid, atunci după direcția $\boldsymbol{m}$ se pot propaga o undă cvasilongitudinală avînd vectorul de polarizare $\boldsymbol{p}_{(0)}$, a cărei viteză de fază, $v_{(0)}$, este determinată de valoarea proprie simplă, $\rho v^2_{(0)}$, precum și o mulțime de unde cvasitransversale avînd vitezele aceleași, egale cu $v_{(1)}$, ale căror vectori de polarizare pot lua orice direcție posibilă, perpendiculară pe $p_{(0)}$. Una dintre aceste unde este pur transversală ; vectorul ei de polarizare este $\boldsymbol{p}_{(1)} \| (\boldsymbol{p}_{(0)} \times \boldsymbol{m})$. Direcția $\boldsymbol{m}$ se numește, în acest caz, *axă acustică*. Dacă $\boldsymbol{m}$ va fi totodată și o normală longitudinală, adică $\boldsymbol{p}_{(0)} = \boldsymbol{m}$, atunci toate undele, polarizate perpendicular pe $\boldsymbol{p}_{(0)}$, vor fi transversale, direcția fiind denumită *axă acustică longitudinală* (v. Hatkevici, 1962).

Pentru calcularea vitezei de fază a unei unde elastice, trebuie găsită valoarea proprie corespunzătoare a tensorului Christoffel. Această metodă laborioasă este inevitabilă însă numai în cazul în care direcția vectorului de polarizare, $\boldsymbol{p}$, nu este cunoscută. Dacă se cunoaște această direcție, atunci viteza undei se calculează imediat după formula

$$v = \sqrt{\frac{1}{\rho} \boldsymbol{pm} : \mathbf{c} : \boldsymbol{mp}} = \sqrt{\frac{1}{\rho} c_{ijkl}\, p_i\, m_j\, m_k\, p_l}\,, \tag{56.6}$$

pe care o putem transcrie într-o formă mai comodă pentru calcule

$$v = \sqrt{\frac{1}{\rho} c_{\lambda\mu}\, L_\lambda\, L_\mu}\,, \tag{56.7}$$

unde

$$L_\lambda = \begin{cases} p_i\, m_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3), \\ p_i\, m_j + m_i\, p_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6). \end{cases}$$

În particular, viteza de fază a undei longitudinale este

$$v = \sqrt{\frac{1}{\rho} c_{\lambda\mu} N_\lambda\, N_\mu}, \tag{56.8}$$

unde

$$N_\lambda = \begin{cases} m_i\, m_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3), \\ 2\, m_i\, m_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6). \end{cases}$$

Deducerea formulelor (56.7) şi (56.8) este dată în anexa F. Menţionăm că pentru utilizarea formulei (56.7) trebuie să ne asigurăm că vectorii $\boldsymbol{m}$ şi $\boldsymbol{p}$ daţi pot servi drept normală de undă şi, respectiv, vector de polarizare al aceleiaşi unde elastice. Analog, formula (56.8) poate fi utilizată numai în cazul în care ne-am convins că $\boldsymbol{m}$ este normala longitudinală a cristalului considerat.

Cînd o undă elastică se propagă printr-un mediu anizotrop, în general, fluxul de energie deviază faţă de normala la undă.

Viteza şi direcţia fluxului de energie sînt determinate de vectorul *viteză radială* sau viteză de grup

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{\partial \omega}{\partial \boldsymbol{k}}, \quad \omega_i = \frac{\partial \omega}{\partial k_i}. \tag{56.9}$$

Pentru a stabili legătura dintre viteza radială şi celelalte caracteristici ale undei elastice, înmulţim scalar ambele părţi ale ecuaţiei Christoffel, (56.3), cu vectorul de polarizare, $\boldsymbol{p}$. Obţinem egalitatea

$$c_{ijkl}\, p_i\, m_j\, m_k\, p_l = \rho v^2, \quad \boldsymbol{pm} : \mathbf{c} : \boldsymbol{mp} = \rho v^2. \tag{56.10}$$

Înmulţind ambii membri ai acesteia cu $4\pi^2/\lambda^2$, se poate aduce egalitatea sub forma

$$c_{ijlm}\, p_i\, k_j\, k_l\, p_m = \rho\omega^2, \quad \boldsymbol{pk} : \mathbf{c} : \boldsymbol{kp} = \rho\omega^2. \tag{56.11}$$

Diferenţiind (56.11) în raport cu $\boldsymbol{k}$, obţinem

$$\cdot\, \mathbf{c} : \boldsymbol{kp} + \boldsymbol{pk} : \mathbf{c} \cdot \boldsymbol{p} = 2\rho\omega \frac{\partial \omega}{\partial \boldsymbol{k}}.$$

De aici, folosind formula (56.9) şi simetria interioară a tensorului $\mathbf{c}$, găsim viteza radială

$$w_j = \frac{1}{\rho\omega} c_{ijlm}\, p_i\, p_m\, k_l, \quad \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{\rho\omega} (\boldsymbol{p} \cdot \mathbf{c} \cdot \boldsymbol{p}) \cdot \boldsymbol{k};$$

pe care este mai comod să o exprimăm în funcţie de v şi $\boldsymbol{m}$

$$w_j = \frac{1}{\rho v} c_{ijkl}\, p_i\, p_l\, m_k, \quad \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{\rho v} (\boldsymbol{p} \cdot \mathbf{c} \cdot \boldsymbol{p}) \cdot \boldsymbol{m}. \tag{56.12}$$

Tensorul simetric de rangul doi,

$$P_{jk} = c_{ijkl}\, p_i\, p_l, \quad \mathbf{P} = \boldsymbol{p} \cdot \mathbf{c} \cdot \boldsymbol{p}, \tag{56.13}$$

se numeşte cel de *al doilea tensor al lui Christoffel*. Înlocuindu-l în (56.12), obţinem

$$w_j = \frac{1}{\rho v} P_{jk} m_k, \quad \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{\rho v} \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{m}. \tag{56.14}$$

Dacă direcţia vitezei radiale a unei unde elastice coincide cu normala de undă, vom numi această undă (prin analogie cu optica cristalelor) undă *ordinară*, iar dacă direcţia vitezei nu coincide cu normala, vom numi unda *extraordinară*. Din ecuaţia (56.14) reiese clar că o undă elastică este ordinară numai în cazul în care vectorul normalei de undă, $\boldsymbol{m}$, este un vector propriu al celui de al doilea tensor al lui Christoffel, $\mathbf{P}$. Toate undele longitudinale sînt, în particular, unde ordinare. Într-adevăr, în cazul unei unde longitudinale, $\boldsymbol{m}$ este vectorul polarizării şi de aceea este vector propriu al primului tensor Christoffel, $\mathbf{M}$; tot din aceeaşi cauză însă pentru unda longitudinală ambii tensori Christoffel coincid, deci $\boldsymbol{m}$ este vector propriu şi al celui de al doilea tensor Christoffel, $\mathbf{P}$.

Geometric, este evident că proiecţia vectorului viteză radială pe direcţia normalei de undă este egală cu viteza de fază. Această concluzie nu este greu de dedus analitic. Înmulţind scalar ambii membri ai relaţiei (56.12) cu vectorul unitar al normalei undei, $\boldsymbol{n}$, şi avînd în vedere (56.10), obţinem

$$\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{m} = v. \tag{56.15}$$

Aşadar, viteza radială este egală cu viteza de fază numai în cazul undei ordinare; în cazul undei extraordinare viteza radială depăşeşte viteza de fază şi aceasta cu atît mai mult cu cît direcţia fluxului de energie se abate mai tare de la normala de undă. Unghiul ψ dintre direcţia fluxului de energie şi normala undei este dat de relaţia

$$\cos\psi = \boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{s}, \tag{56.16}$$

unde $\boldsymbol{s} = \boldsymbol{w}/w$ este vectorul unitar al razei. Din ecuaţia (56.14) îl scoatem pe $\boldsymbol{w}/w$ şi, înmulţind scalar cu $\boldsymbol{m}$, obţinem

$$\cos\psi = \frac{\boldsymbol{m} \cdot \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{m}}{\sqrt{\boldsymbol{m} \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{m}}} = \frac{\rho v^2}{\sqrt{P_{ij} P_{ik} m_j m_k}}. \tag{56.17}$$

Trebuie avut în vedere că deviația razei de la normala de undă atinge uneori zeci de grade (v., de exemplu, figurile 56.6, 56.11, 56.14, 56.16), încît omiterea sa este inadmisibilă. În general, în acustica cristalelor anizotropia cristalelor se manifestă mult mai pregnant decît în cadrul opticii cristalelor, mai ales în domeniul luminii vizibile (în domeniul infraroșu anizotropia proprietăților optice ale cristalelor apare ceva mai evident).

După o direcție $\boldsymbol{m}$, care nu este axă acustică, se pot propaga trei unde polarizate reciproc perpendicular, avînd vectorii de polarizare $\boldsymbol{p}_{(0)}$, $\boldsymbol{p}_{(1)}$, $\boldsymbol{p}_{(2)}$ și vitezele de fază $v_{(0)}$, $v_{(1)}$, $v_{(2)}$. Fiecăreia dintre ele îi corespunde un vector viteză radială,

$$\boldsymbol{w}_{(i)} = (\rho v_{(i)})^{-1}\mathbf{P}_{(i)}\cdot\boldsymbol{m}.$$

În direcția axei acustice se pot propaga însă, în afară de undele cvasilongitudinale, $\{\boldsymbol{m}, \boldsymbol{p}_{(0)}\}$, și mulțimea undelor cvasitransversale, $\{\boldsymbol{m}, \boldsymbol{p}_{(\varphi)}\}$, φ fiind unghiul măsurat de la o anumită direcție, în planul propriu al tensorului $\mathbf{M}$. Acestora le corespund mulțimea de raze

$$\boldsymbol{w}_{(\varphi)} = \frac{1}{\rho v_{(1)}}\mathbf{P}_{(\varphi)}\cdot\boldsymbol{m}. \qquad (56.18)$$

Aceste raze formează, evident, un con, iar întregul tablou reprezintă analogul acustic al cunoscutului fenomen de *refracție conică interioară*, din optica cristalelor (v. § 39) (amănunte, despre refracția conică interioară se găsesc în Hatkevici, 1962, a, în Aleksandrov și Rîjova, 1964, și în Viswanathan, 1969).

Să examinăm, de exemplu, o undă elastică ce se propagă într-un cristal al sistemului trigonal, după axa principală de simetrie, $\boldsymbol{m} = \boldsymbol{e}_3$, a acestuia. Atunci tensorul Christoffel este $M_{il} = c_{i33l}$, ceea ce, pentru cristalele din sistemul trigonal, dă (v. tab. E.18)

$$\| M_{il} \| = \begin{Vmatrix} c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & c_{33} \end{Vmatrix}.$$

Acest tensor posedă o valoare proprie simplă, c_{33}, care corespunde vectorului propriu

$$\boldsymbol{p}_{(0)} = \boldsymbol{e}_3 = \boldsymbol{m},$$

adică unei unde longitudinale, care se propagă cu viteza

$$v_{(0)} = \sqrt{\frac{c_{33}}{\rho}},$$

şi o valoare proprie dublă, c_{44}, care corespunde mulţimii vectorilor proprii

$$\boldsymbol{p}_{(\varphi)} = \boldsymbol{e}_1 \cos\varphi + \boldsymbol{e}_2 \sin\varphi,$$

adică tuturor undelor transversale posibile ($\boldsymbol{p}_{(\varphi)} \perp \boldsymbol{m}$), care se propagă cu viteza

$$v_{(1)} = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}.$$

Fiecăreia dintre aceste unde îi corespunde cîte un al doilea vector Christoffel, al său,

$$P_{il}^{(\varphi)} = c_{i11l} \cos^2\varphi + c_{i22l} \sin^2\varphi + (c_{i12l} + c_{i21l}) \sin\varphi \cos\varphi.$$

Ţinînd cont de forma tensorului c pentru un cristal din sistemul trigonal*, obţinem

$$\|P_{il}^{(\varphi)}\| =$$

$$\left\|\begin{matrix} c_{11}\cos^2\varphi + c_{66}\sin^2\varphi & (c_{11}-c_{66})\cos\varphi\sin\varphi & 2c_{14}\sin\varphi\cos\varphi \\ (c_{11}-c_{66})\cos\varphi\sin\varphi & c_{11}\sin^2\varphi + c_{66}\cos^2\varphi & c_{14}(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi) \\ 2c_{14}\cos\varphi\sin\varphi & c_{14}(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi) & c_{44} \end{matrix}\right\|.$$

Din această cauză, fiecărei unde transversale, avînd vectorul de polarizare $\boldsymbol{p}_{(\varphi)}$, îi corespunde viteza sa radială

$$\boldsymbol{w}_{(\varphi)} = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}\left[\boldsymbol{e}_3 + \frac{c_{14}}{c_{44}}(\boldsymbol{e}_1 \sin 2\varphi + \boldsymbol{e}_2 \cos 2\varphi)\right].$$

Prin urmare, fiecare rază face cu direcţia normalei de undă, $\boldsymbol{m} = \boldsymbol{e}_3$, un unghi

$$\psi = \operatorname{arctg} \frac{c_{14}}{c_{44}},$$

* Aici, cu ajutorul relaţiei $c_{11} - c_{12} = 2c_{66}$, s-a eliminat $c_{12} = c_{11} - 2c_{66}$. Se presupune că $c_{25} = 0$; pentru cristalele din sistemul superior aceasta are loc deja într-un sistem de coordonate cristalofizic, iar pentru subsistemul inferior — într-un sistem de coordonate special (v. § 52).

iar toate împreună dau naştere unui con circular. Reprezentînd simultan polarizarea pentru direcţia fiecărei raze, obţinem distribuţia polarizării în raport cu conul, arătată în figura 56.1.

Direcţiile ⟨111⟩ din cristalele sistemului cubic sînt axe de simetrie de ordinul trei, în jurul lor producîndu-se, de asemenea, o

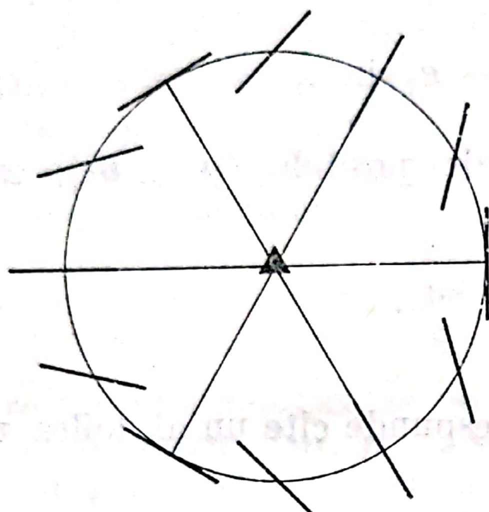


Fig. 56.1. Distribuţia direcţiilor de polarizare în cadrul refracţiei conice în jurul axei de simetrie de ordinul trei. Sînt trasate planurile de simetrie. Axele de ordinul doi trebuie să fie reprezentate sub planul desenului (aceasta nu este o proiecţie stereografică).

refracţie conică a undelor polarizate transversal. Deviaţia razelor de la normala de undă este, în acest caz, egală cu

$$\psi = \operatorname{arctg} \frac{c_{11} - c_{12} - 2c_{44}}{\sqrt{2}(c_{11} - c_{12} + c_{44})} .$$

Refracţia conică din acustica cristalelor, spre deosebire de cea din optica cristalelor, nu este un efect mic; iată unghiurile ψ pentru cîteva cristale:

Trigonale:	safir	cuarţ	calcit
	$\psi = 9°05'$	$17°10'$	$30°45'$
Cubice:	NaCl	siliciu	fluorit
	$\psi = 8°40'$	$12°40'$	$13°40'$

În cazul în care undele elastice se propagă de-a lungul direcţiilor legate de elementele de simetrie elastică ale cristalului, undele pot fi longitudinale, transversale, ordinare etc. Studiul perspectivelor ce apar se bazează pe faptul că axele de simetrie ale tensorilor Christoffel, **M** şi **P**, coincid cu vectorii lor proprii; vectorii proprii ai tensorului $\mathbf{M}(\boldsymbol{m})$ servesc, pe de altă parte, drept vectori de polarizare undelor elastice avînd normala $\boldsymbol{m}$, iar coincidenţa unuia dintre vectorii proprii ai tensorului $\mathbf{P}(\boldsymbol{p})$ cu normala de undă $\boldsymbol{m}$ ne spune că unda $\{\boldsymbol{m}, \boldsymbol{p}\}$ este o undă ordinară.

Tensorul $\mathbf{M} = \boldsymbol{m} \cdot \mathbf{c} \cdot \boldsymbol{m}$ este determinat de tensorul $\mathbf{c}$ și diada $\boldsymbol{mm}$; conform principiului Curie, printre elementele de simetrie ale acestui tensor trebuie obligatoriu să se afle și cele care sînt comune atît lui $\mathbf{c}$ cît și lui $\boldsymbol{mm}$

$$G(\mathbf{N}) \supseteq G(\mathbf{c}) \cap G(\boldsymbol{mm}). \tag{56.19}$$

Grupurile $G(\mathbf{c})$, adică grupurile simetriei elastice ale unui cristal, sînt enumerate în § 52; grupul de simetie al diadei $\boldsymbol{mm}$ este $\mathrm{G}(\boldsymbol{mm}) = \infty/mm$, axa principală de simetrie coincizînd cu direcția $\boldsymbol{m}$. Pentru tensorul $\mathbf{P}(\boldsymbol{p})$, în mod analog, obținem

$$G(\mathbf{P}) \supseteq G(\mathbf{c}) \cap G(\boldsymbol{pp}). \tag{56.20}$$

Plecînd de la aceste relații, să trecem la analiza unor cazuri particulare.

1. Fie ca vectorul $\boldsymbol{m}$ să coincidă cu una dintre axele de simetrie de ordinul $N > 2$. Atunci această axă este o axă de simetrie de același ordin și pentru tensorul **M**. Însă, deoarece, conform teoremei lui Hermann, toate axele de ordin superior lui doi constituie pentru tensorii de rangul doi axe de ordin infinit, tensorul **M** va avea simetria ∞/mm; cele două valori proprii ale sale coincid; unul dintre vectorii săi proprii este orientat după axa ∞ (adică după direcția $\boldsymbol{m}$), ceilalți completînd planul perpendicular. De aici rezultă că toate axele de simetrie de ordinul $N > 2$ reprezintă axe acustice longitudinale ale cristalului. Undele elastice care se propagă de-a lungul lor sînt fie longitudinale, fie transversale, undele transversale putînd avea orice polarizare, iar vitezele tuturor acestor unde transversale sînt egale.

Conform regulii generale, undele longitudinale sînt unde ordinare, undele transversale necesitînd o examinare separată. La punctul 2 se demonstrează că undele transversale sînt unde ordinare, chiar și atunci cînd normala de undă este orientată după o axă de simetrie de ordinul doi. Este clar că acest lucru este, de asemenea, adevărat, atît pentru axa de ordinul șase (infinit) cît și pentru axa de ordinul patru. Deoarece orice direcție dintr-un corp izotrop poate fi luată drept axă ∞, aceste proprietăți vor fi caracteristice tuturor undelor elastice în corpurile izotrope. Undele transversale care se propagă de-a lungul unei axe de simetrie de ordinul trei sînt unde extraordinare, așa cum s-a arătat mai sus.

2. Fie un vector $\boldsymbol{m}$ orientat după una dintre axele de simetrie de ordinul doi ale tensorului **c**. Această axă este o axă de simetrie de ordinul doi și pentru tensorul **M**; aceasta înseamnă că unul dintre vectorii săi proprii este orientat după ea, iar ceilalți doi sînt perpendiculari pe ea. Prin urmare, axele de simetrie de ordinul doi ale tensorului **c** au rolul de normale longitudinale ale cris-

talului, fără a fi însă axele lui acustice. Simultan cu unda longitudinală, de-a lungul axei de ordinul doi se propagă două unde transversale, care au viteze de fază diferite şi polarizări strict determinate, $p_{(1)} \perp m$ şi $p_{(2)} \perp m$. Dacă tensorul **c** are pe lîngă axa $2 \parallel m$ o axă de simetrie de ordin par, perpendiculară pe axa de ordinul doi, atunci unul dintre vectorii transversali de polarizare este orientat după această axă; în acest caz şi direcţia celui de al doilea vector de polarizare transversal va fi axă de ordinul doi pentru tensorul **c**. Dacă însă tensorul **c** nu are axe de simetrie de ordin par, perpendiculare pe $2 \parallel m$, direcţia vectorilor transversali de polarizare este determinată de coeficienţii de elasticitate ai cristalului; aşa se întîmplă, de exemplu, în cristalele sistemelor trigonal şi monoclinic.

Nu numai unda longitudinală, ci şi ambele unde transversale sînt unde ordinare chiar şi în cazul general, cînd în $G(\mathbf{c})$ nu intră axele de ordin par, perpendiculare pe axa $2 \parallel m$. Acest fapt se explică prin aceea că axa $2 \parallel m$ face parte din intersecţia grupurilor $G(\mathbf{c}) \cap G(p_{(1)}p_{(1)})$ şi $G(\mathbf{c}) \cap G(p_{(2)}p_{(2)})$ (fig. 56.2) şi de aceea serveşte ca axă de ordinul doi şi pentru tensorii $\mathbf{P}(p_{(1)})$ şi $\mathbf{P}(p_{(2)})$.

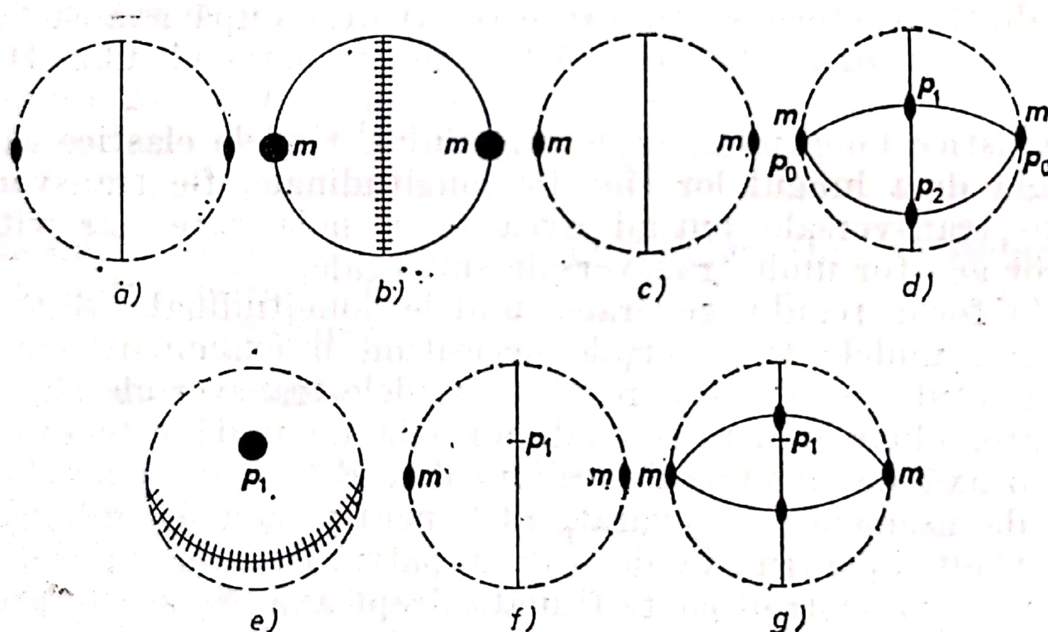


Fig. 56.2. Demonstraţia practică a faptului că de-a lungul axelor de simetrie de ordinul doi se propagă o undă elastică longitudinală şi două unde elastice transversale şi a faptului că nu numai unda longitudinală, ci şi cele transversale sînt unde ordinare. *a*) şi *b*) Proiecţiile stereografice ale elementelor simetriei elastice, $G(\mathbf{c})$, şi ale elementelor de simetrie ale diadei normalei de undă, $G(mm)$, ţinîndu-se cont de poziţia lor reciprocă; *c*) intersecţia acestor grupuri; intersecţia face parte din grupul $G(\mathbf{M})$ al tensorului **M**; *d*) elementele de simetrie $G(\mathbf{M})$; după axele 2 sînt orientaţi vectorii polarizare, p_k, unul dintre ei (p_0) coincizînd cu m; lui îi corespunde o undă longitudinală; *e*) elementele de simetrie $G(p_1p_1)$; *f*) intersecţia grupurilor $G(p_1p_1)$ şi $G(\mathbf{c})$; ea face parte din grupul $G(\mathbf{P}_1)$; *g*) elementele de simetrie ale tensorului $\mathbf{P}_1$; una dintre axele 2 coincide cu m, ceea ce arată că unda $[m, p_1]$ este o undă ordinară.

3. Fie vectorul $\boldsymbol{m}$ perpendicular pe axa de simetrie de ordinul doi a tensorului $\mathbf{c}$, sau, ceea ce este acelaşi lucru, cuprins în unul dintre planurile lui de simetrie. Atunci, această axă de ordinul doi va fi totodată axă de ordinul doi şi pentru diada $\boldsymbol{mm}$ şi deci şi pentru tensorul $\mathbf{M}(\boldsymbol{m})$. Rezultă că unul dintre vectorii săi proprii coincide cu ea. Această axă fiind însă perpendiculară pe vectorul $\boldsymbol{m}$, rezultă că vectorul propriu al tensorului $\mathbf{M}$ care este orientat după ea va fi tocmai vectorul de polarizare al undei pur transversale. Ceilalţi doi vectori de polarizare nu sînt, în general, nici longitudinali, nici transversali. Aşadar, toate direcţiile perpendiculare pe axele de ordinul doi ale tensorului $\mathbf{c}$, sau care se află în planul lui de simetrie, reprezintă normale, care sînt transversale. În acest caz nu există nici un motiv să ne aşteptăm ca vreuna dintre unde (nici măcar cea transversală) să fie undă ordinară.

4. Pentru că axele de simetrie de ordinul şase (infinit) şi de ordinul patru sînt concomitent şi axe de ordinul doi, direcţiile perpendiculare pe aceste axe sînt, de asemenea, normale transversale. Însă spre deosebire de direcţiile perpendiculare pe axele de simetrie de ordinul doi, direcţiile perpendiculare la axele de ordinul şase (infinit) şi ordinul patru mai au şi alte proprietăţi deosebite. Evident, este suficient să examinăm direcţiile care se află în planul (001) al unui cristal din sistemul tetragonal. Pentru aceste direcţii, vectorul normalei de undă poate fi reprezentat sub forma

$$\boldsymbol{m} = \boldsymbol{e}_1 \cos \varphi + \boldsymbol{e}_2 \sin \varphi,$$

iar tensorul Christoffel capătă forma

$$M_{il} = c_{i11l} \cos^2 \varphi + c_{i22l} \sin^2 \varphi + (c_{i12l} + c_{i21l}) \sin \varphi \cos \varphi.$$

Pentru cristalele sistemului tetragonal aceasta dă

$$\| M_{il} \| = \begin{Vmatrix} c_{11} \cos^2 \varphi + c_{66} \sin^2 \varphi & (c_{12} + c_{66}) \sin \varphi \cos \varphi & 0 \\ (c_{12} + c_{66}) \sin \varphi \cos \varphi & c_{11} \sin^2 \varphi + c_{66} \cos^2 \varphi & 0 \\ 0 & 0 & c_{44} \end{Vmatrix}.$$

De aici se vede clar că atît direcţia vectorului de polarizare a undei transversale, $\boldsymbol{p}_{(1)} = \boldsymbol{e}_3$, cît şi viteza acestei unde, $v_{(1)} = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$, nu depind de direcţiile normalei de undă la planul (001), adică de unghiul φ. Prin urmare, planul (001), în cristalele sistemului tetragonal, este izotrop faţă de undele elastice polarizate perpendicular pe acest plan : ele se propagă toate cu aceeaşi viteză. În cristalele sistemului hexagonal aceeaşi proprietate o are planul

(0001), iar în cristalele din sistemul cubic — toate planurile de tipul {100}.

Al doilea tensor al lui Christoffel pentru astfel de unde, $P_{il} = c_{i33l}$, capătă, pentru cristalele sistemului tetragonal, forma

$$\| P_{il} \| = \begin{Vmatrix} c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & c_{33} \end{Vmatrix}.$$

Coincidenţa celor două valori proprii ale sale arată că întregul plan X_1X_2, adică (001), este un plan propriu pentru el. Astfel, pentru orice direcţie a vectorului $\boldsymbol{m}$ într-un plan izotrop, al doilea tensor al lui Christoffel este un vector propriu al tensorului P şi deci undele care se propagă într-un plan izotrop fiind polarizate perpendicular pe el, vor fi unde ordinare.

Aceste proprietăţi ale undelor elastice ce se propagă în planuri izotrope sînt folosite la fabricarea conductorilor de sunet monocristalini pentru liniile ultrasonore de întîrziere, adică a dispozitivelor pentru acumularea semnalelor ultrasonore. Destinaţia liniei de întîrziere constă în conservarea semnalelor obţinute de la un impuls, pentru compararea cu semnalele ulterioare. În conductorii de sunet monocristalini se utilizează principiul reflexiei multiple. Conductorul de sunet monocristalin al unei linii ultrasonore de întîrziere este o prismă poliedrică ale cărei baze superioară şi inferioară sînt paralele cu planul izotrop al cristalului. Direcţia vibraţiilor mecanice este perpendiculară la planul de propagare a undei, fiind determinată de un transformator piezomixer. Feţele laterale ale prismei, în afară de două, reflectă unda ultrasonoră. Cele două feţe pe care se fixează mixerele nu participă la reflexie. Acestea sînt feţele emiţătoare şi receptoare.

Mersul unei raze prin conductorul de sunet este dat în figura 56.3. Unda de forfecare avînd vectorul de deplasare paralel cu faţa reflectoare a conductorului de sunet nu se transformă în nici un alt fel de tip de undă, oricare ar fi unghiul de

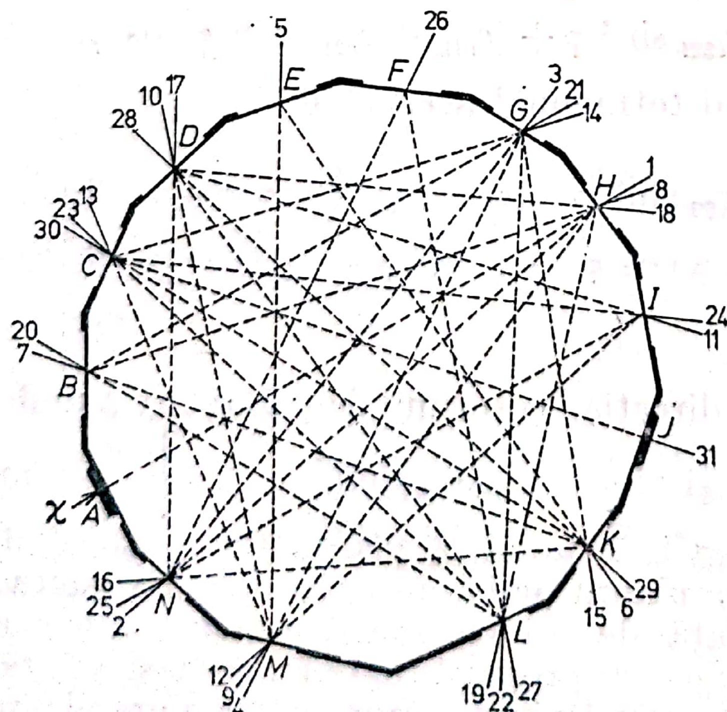


Fig. 56.3. Mersul razelor într-un conductor de sunete al unei linii ultrasonore de întîrziere.

incidență pe o față și se reflectă, astfel încît unghiul de incidență să fie egal cu unghiul de reflexie. Rezultă deci că traiectoria razei prin conductorul de sunet poate fi calculată cu ajutorul legilor opticii geometrice. Timpul de întîrziere al conductorului de sunet este $\tau = l/v$, unde l este lungimea traiectoriei fasciculului, v fiind viteza undei în material. Pentru mărirea timpului de întîrziere, se aleg materiale cu viteze ale sunetului relativ mici, de o importanță esențială fiind elaborarea unor configurații cu l cît mai mare. Deoarece mărirea traiectoriei prin creșterea numai a dimensiunilor conductorului nu este convenabilă, iar micșorarea fețelor reflectoare provoacă amplificarea semnalelor parazite, pentru mărirea lui l se caută creșterea coeficientului de umplere a conductorului de sunet, $h = l/r$, r fiind dimensiunea maximă a conductorului de sunet. Acest parametru, care depinde de forma și dimensiunile conductorului de sunet, caracterizează densitatea umplerii lui cu unda ultrasonoră: cu cît este mai mare h, cu atît se poate obține un timp de întîrziere mai mare, pentru un gabarit dat al conductorului de sunet.

Mai sus au fost studiate toate cazurile în care o anumită direcție din cristal este fie normală longitudinală, fie normală transversală, fie axă acustică, ca urmare a poziției sale particulare față de elementele de simetrie ale tensorului coeficienților de elasticitate, **c**. Totuși, această poziție particulară față de elementele de simetrie ale tensorului **c**, care este o condiție suficientă, nu este nici pe departe și necesară, pentru ca direcția dată să reprezinte o normală longitudinală sau transversală sau să fie axă acustică. În realitate, normale longitudinale, așa cum a arătat F.I. Fiodorov (1965), există în orice cristal, oricare ar fi simetria sa. Demonstrația se bazează pe faptul că dacă vectorul $\boldsymbol{m}$ reprezintă o normală longitudinală el va fi vector propriu al tensorului **M**, adică satisface ecuația

$$\boldsymbol{m}\cdot\mathbf{c} : \boldsymbol{mm} = \rho v^2 \boldsymbol{m}, \qquad c_{ijkl} m_j m_k m_l = \rho v^2 m_i. \tag{56.21}$$

Să examinăm acum funcția

$$F(\boldsymbol{m}) = \boldsymbol{mm} : \mathbf{c} : \boldsymbol{mm} = c_{ijkl} m_i m_j m_k m_l, \tag{56.22}$$

în care $\boldsymbol{m}$ este vectorul unitar

$$f(\boldsymbol{m}) = 2(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{m} - 1) = 2(m_i m_i - 1) = 0. \tag{56.23}$$

Funcția $F(\boldsymbol{m})$ este definită pe suprafața sferei $\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{m} = 1$ și, ca orice funcție continuă, definită pe o mulțime închisă, atinge, pe această mulțime, valoarea sa cea mai mare și valoarea cea mai mică. Pentru valorile corespunzătoare ale lui $\boldsymbol{m}$ sînt satisfăcute ecuațiile extremului condițional, sub forma lui Lagrange

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{m}}(F - \lambda f) = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial m_i}(F - \lambda f) = 0. \tag{56.24}$$

Substituind funcţiile F şi f, definite cu formulele (56.22) şi (56.23), în (56.24) vom obţine exact ecuaţiile normalei longitudinale, (56.21); multiplicatorul lui Lagrange, λ, nedeterminat, este egal cu ρv^2. Prin urmare, în orice cristal există cel puţin două normale longitudinale: una dintre ele corespunde celei mai mari valori a lui F, iar cealaltă celei mai mici valori a lui F. În figura 56.4 este

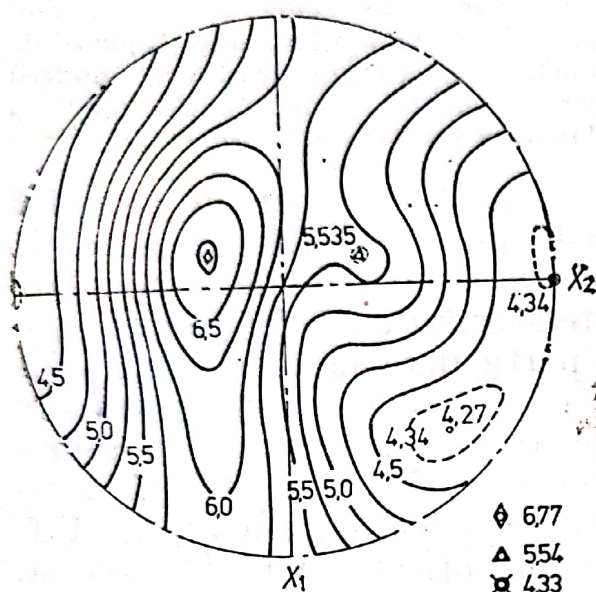


Fig. 56.4. Proiecţia stereografică a liniilor de nivel ale funcţiei $F(\mathbf{m}) = c_{ijkl}m_i m_j m_k m_l$, pentru un cristal triclinic de sulfat de cupru, în 10^{-3} N/m² (v. tabelul 52.2). În direcţiile care corespund punctelor staţionare ale acestei funcţii, se propagă unde longitudinale.

reprezentată această funcţie pentru cristalul triclinic al sulfatului de cupru, punctelor staţionare corespunzîndu-le normalele longitudinale.

Pentru a ne da seama dacă într-un cristal oarecare există măcar o singură axă acustică, este necesară cunoaşterea în prealabil a *suprafeţei vitezelor de fază.* Aceasta este formată din vîrfurile tuturor vectorilor posibili ai vitezelor de fază, $\boldsymbol{v} = v\boldsymbol{m}$, duşi dintr-un acelaşi punct — centrul suprafeţei. Ecuaţia acestei suprafeţe

$$\det \| c_{ijkl}v_j v_k - \rho v^4 \delta_{il} \| = 0 \tag{56.25}$$

se obţine din condiţia de existenţă a soluţiilor nenule ale ecuaţiilor Christoffel, (56.3). Deoarece (56.25) este o ecuaţie de gradul 12, ea descrie o suprafaţă de ordinul 12 (în unele cazuri particulare, gradul ecuaţiei (56.25) şi, respectiv, ordinul suprafeţei vitezelor de fază poate fi cu mult mai mic). Deoarece fiecărei direcţii $\boldsymbol{m}$ îi corespund, în general, trei valori ale lui v, suprafaţa are trei pînze. Se pot găsi însă şi astfel de direcţii $\boldsymbol{m}$, după care două dintre cele trei valori ale lui v să coincidă, ceea ce face ca două pînze ale suprafeţei vitezelor de fază să aibă un punct comun; aceste direcţii vor fi tocmai axele optice. Cea mai răspîndită, şi pînă

nu de mult şi singura configuraţie cunoscută a suprafeţei vitezelor de fază, pentru care pînza exterioară reprezintă o undă cvasilongitudinală, cuprinzînd totodată două pînze ale undelor transversale, fără a se atinge de ele, este reprezentată în figurile 56.5, *a*, 56.7, *a*, 56.9, *a* şi *d*, 56.10, *a*, 56.12, 56.13. În toate figurile acestea pînzele undelor cvasitransversale au puncte comune care corespund axelor

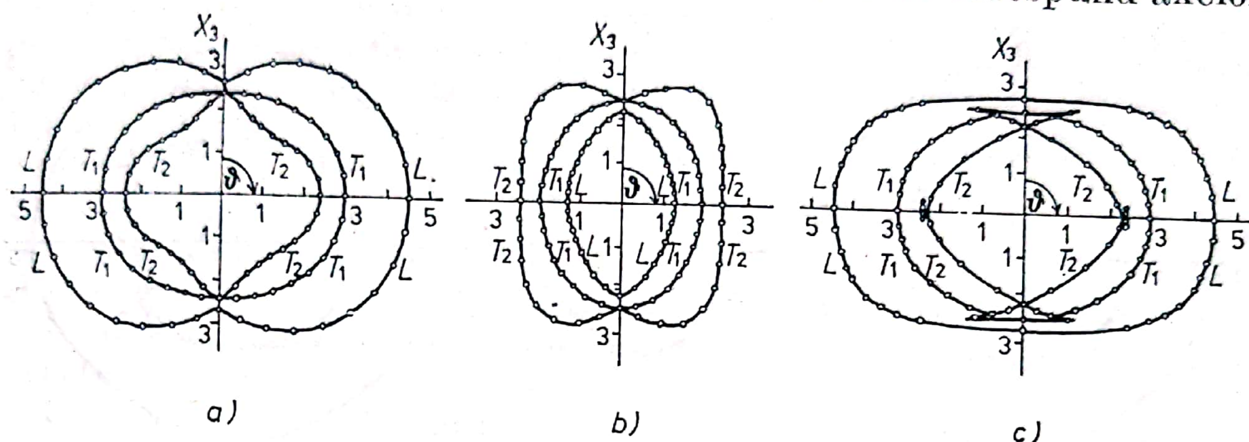


Fig. 56.5. Suprafeţele vitezelor de fază (*a*), ale vitezelor inverse, înmulţite cu c_{11}/ρ (*b*) şi ale vitezelor radiative (*c*) pentru cristalul de zinc, clasa 6/*mmm*. Secţiuni cu planuri ce trec prin axa principală de simetrie. L — unde cvasilongitudinale, T_1 — unde transversale, T_2 — unde cvasitransversale; în km/s (Musgrave, 1954).

acustice. În majoritatea cazurilor, acestea sînt direcţii izolate: în cazul cristalelor hexagonale şi trigonale direcţia ⟨0001⟩, în cazul cristalelor cubice — direcţiile ⟨100⟩ şi ⟨111⟩. În cristalul de beriliu însă există un întreg con de axe acustice (intersecţiile lui cu planul secţiunii sînt notate în figura 56.7 cu literele *D*).

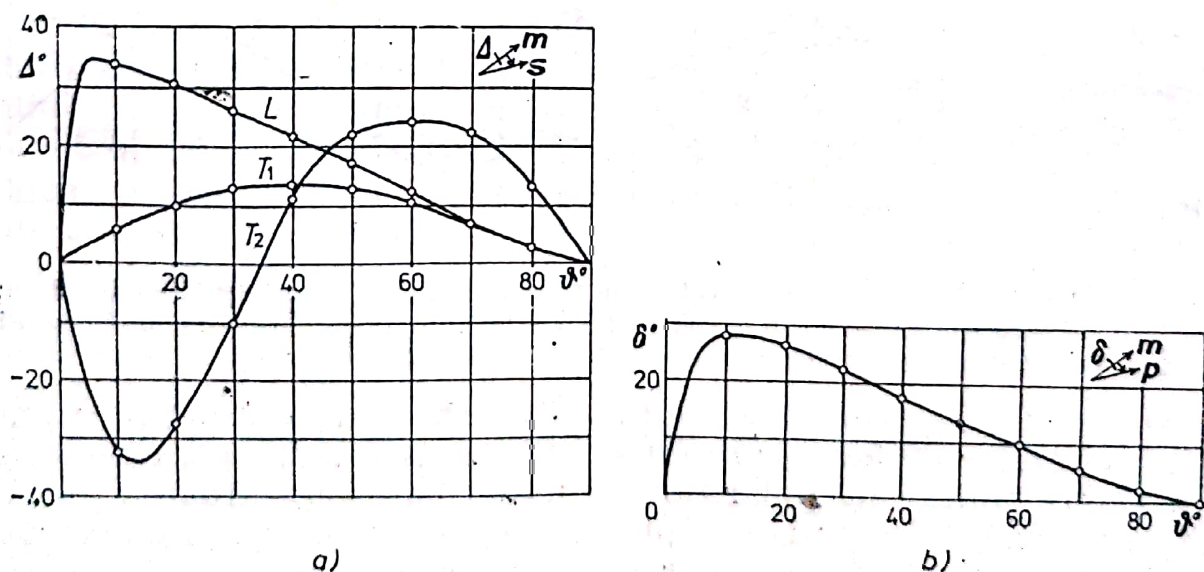


Fig. 56.6. Unghiul de deviaţie al razelor (*a*) şi al vectorului polarizare al unei noi unde cvasilongitudinale (*b*) faţă de direcţia normalei de undă într-un cristal de zinc. Unghiul θ se măsoară de la [0001] către (0001); unghiul Δ şi unghiul δ către (0001); se consideră pozitive în cazul deviaţiei către (0001). Pentru L, T_1, T_2, v. figura 56.5 (Musgrave, 1954).

Faptul că cristalul, în cazul unei configuraţii de acest fel a suprafeţei vitezelor de fază, independent de simetria sa, posedă cel puţin o axă acustică, rezultă dintr-o teoremă generală de topologie : dacă $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{m})$ este un cîmp vectorial continuu, tangent la sfera $\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{m} = 1$, atunci există cel puţin o valoare $\boldsymbol{m}=\boldsymbol{m}_0$ astfel încît

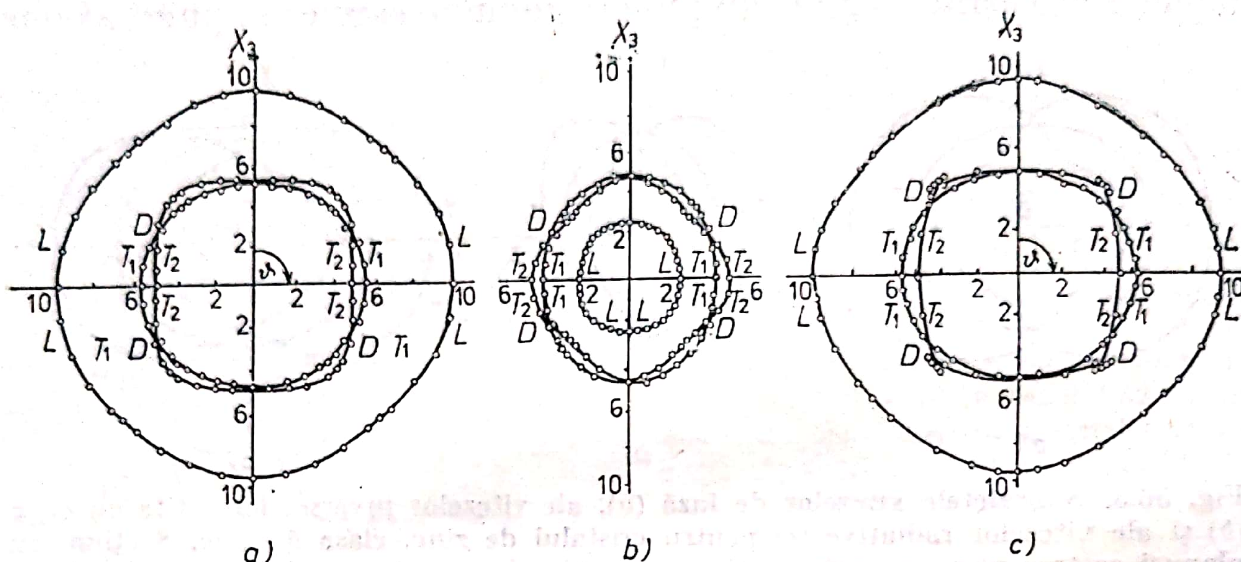


Fig. 56.7. Suprafeţele vitezelor de fază (*a*), ale vitezelor inverse înmulţite cu c_{44}/ρ (*b*) şi ale vitezelor radiative (*c*) pentru cristalul de beril, clasa 6/*mmm*. Secţiuni cu planul care trece prin axa principală de simetrie. *L* — unde cvasilongitudinale, T_1 — unde transversale, T_2 — unde cvasitransversale ; în km/s (Musgrave, 1954).

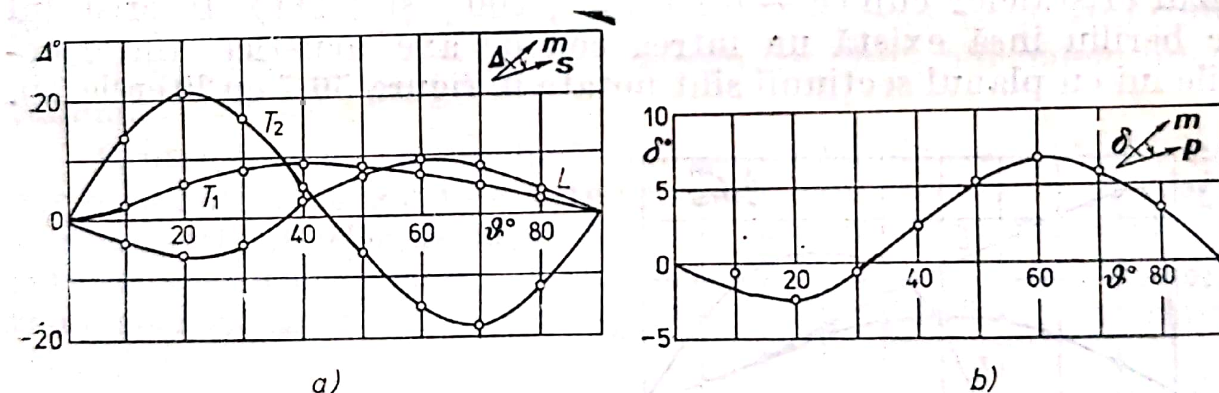


Fig. 56.8. Deviaţia razelor (*a*) şi a vectorului polarizare al unei unde cvasilongitudinale (*b*) faţă de direcţia normalei de undă într-un cristal de beril. Notaţiile sînt cele din figura 56.5 (Musgrave, 1954).

$\boldsymbol{V}(\boldsymbol{m}_0) = 0$ (Steenrod şi Tshinn, 1967). De fiecare punct al suprafeţei vitezelor de fază, care nu se află pe axa acustică, este legat un vector unitar de polarizare al undei corespunzătoare : cvasilongitudinală — de punctele pînzei exterioare, şi cvasitransversală — de punctele pînzei interioare. Să împărţim fiecare dintre aceste cîmpuri vectoriale în două : cîmpul $\boldsymbol{p}_{\parallel}^{(k)}(\boldsymbol{m})$, al vectorilor care sînt fiecare în continuarea vectorului corespunzător, $\boldsymbol{v}^{(k)} = v_{(k)}\boldsymbol{m}$ şi cîmpul $\boldsymbol{p}_{\perp}^{(k)}(\boldsymbol{m})$ al vectorilor perpendiculari pe vectorii corespunzători, $\boldsymbol{v}^{(k)}$. Întrucît pînza exterioară nu se atinge de cele interioare,

ea este homeomorfă (echivalentă topologic) cu o sferă, astfel încît teorema topologică enunţată arată o dată în plus că cel puţin pentru o anumită valoare $m=m_0$, componenta tangenţială a undei cvasilongitudinale, $p_{\perp}^{(0)}(m)$, se anulează şi deci m_0 va fi o normală longitudinală a cristalului. Însă cîmpurile vectoriale $p_{\perp}^{(1,2)}(m)$, care se află pe pînzele interioare ale suprafeţei vitezelor de fază, sînt diferite de zero peste tot. De aici rezultă că aceste pînze nu pot fi separate una de cealaltă, deoarece ele ar fi în acest caz sfere homeomorfe şi, deci, ar avea cel puţin un singur punct comun. Raza vectoare a acestui punct va fi o axă acustică. Aşadar, am demonstrat că pentru o configuraţie a suprafeţei vitezelor de fază ca cea dată, orice cristal are cel puţin o axă acustică*.

Exemplul parateluratului (TeO_2) arată că sînt totuşi posibile şi alte configuraţii ale suprafeţei vitezelor de fază. În figura 56.15, *b* se poate vedea punctul de contact al pînzelor exterioare ale acestei suprafeţe; el corespunde direcţiei care se află în planul (010) şi face cu [100] un unghi de 19,7°. Figura 56.16, *a* arată că în această direcţie are loc o variaţie bruscă a deviaţiei razei de la direcţia normalei de undă. În ciuda acestui fapt, în interiorul unui con circumscris direcţiei [100] — în planul (010), el se află faţă de [100] la distanţa de 19,7°, iar în planul (001) la 8,2° — pînza exterioară a suprafeţei vitezelor de fază corespunde undelor cvasitransversale şi abia următoarea, undei cvasilongitudinale. Aceasta se vede din graficele devierii vectorilor de polarizare de la normala de undă, din figura 56.16, *b*. Se constată că în planul (001) în care unda cvasilongitudinală devine undă cvasitransversală (acesta este desenat punctat) nu se observă nici o particularitate.

Să revenim la problema existenţei axelor acustice în cazul unui cristal cu simetrie oarecare. Conform teoremei anulării cîmpului vectorial continuu, tangent la sferă, orice pînză a suprafeţei vitezelor de fază poate să nu aibă puncte comune cu alte pînze numai atunci cînd un punct oarecare al ei corespunde unei unde pur longitudinale (şi deci o anumită vecinătate a acestui punct cu undele cvasitransversale). Pentru ca într-un cristal să nu existe nici o axă acustică, este necesar şi suficient ca suprafaţa vitezelor lui de fază să fie formată din trei pînze, nici una dintre ele neavînd puncte comune cu celelalte. Pentru aceasta este necesar (însă, fireşte, nu şi suficient), la rîndul său, ca pe fiecare dintre aceste pînze să se găsească cel puţin un punct care să corespundă undei pur longitudinale. Aşadar, analiza topologică nu exclude posibilitatea existenţei unui cristal care să nu aibă nici o axă acustică,

* Exact la fel se poate demonstra că orice cristal are cel puţin o axă optică. Diferenţa constă în faptul că ecuaţiile suprafeţelor optice sînt mai simple, iar direcţiile axelor optice se determină uşor din ele, în timp ce analiza analoagă a ecuaţiilor suprafeţelor acustice este dificilă.

însă un asemenea cristal va trebui să aibă măcar trei normale longitudinale, unda longitudinală ce corespunde uneia dintre acestea trebuind să aibă viteza de fază mare, ca a undelor transversale izonormale ei, unda longitudinală corespunzătoare celei de a doua — mai mică, iar unda longitudinală ce corespunde celei de a treia — o viteză de fază intermediară vitezelor de fază ale undelor transversale izonormale cu ea. Trebuie însă să subliniem că analiza directă a ecuaţiei suprafeţei vitezelor de fază, (56.25), poate da rezultate mai precise (aşa cum se întîmplă cu teorema lui F. I. Fiodorov, care demonstrează existenţa în orice cristal a cel puţin două normale longitudinale, în timp ce, din consideraţiile topologice rezultă doar existenţa a cel puţin unei singure normale longitudinale).

Pentru studiul în continuare al suprafeţei vitezelor şi al altor suprafeţe acustice ale unui cristal, vom reveni la definiţia vitezei radiale, (56.9), separînd în cadrul ei dependenţa lui ω de lungimea k a vectorului de undă $\boldsymbol{k} = k\boldsymbol{m}$ şi de direcţia acestuia, $\boldsymbol{m}$ (viteza radială)

$$\omega_i = \frac{\partial \omega}{\partial k_i} = \frac{\partial \omega}{\partial k}\,\frac{\partial k}{\partial k_i} + \frac{\partial \omega}{\partial m_j}\,\frac{\partial m_j}{\partial k_i}. \tag{56.26}$$

Să analizăm separat fiecare dintre derivatele care intră în descompunerea (56.26). Din relaţia $\omega = vk$ obţinem

$$\frac{\partial \omega}{\partial k} = v \quad \text{şi} \quad \frac{\partial \omega}{\partial m_j} = k\frac{\partial v}{\partial m_j}.$$

Celelalte derivate sînt egale, respectiv, cu

$$\frac{\partial k}{\partial k_i} = \frac{\partial \sqrt{k_l k_l}}{\partial k_i} = \frac{k_i}{k} = m_i,$$

$$\frac{\partial m_j}{\partial k_j} = \frac{\partial (k_j/k)}{\partial k_i} = \frac{1}{k^2}\left(k\,\frac{\partial k_j}{\partial k_i} - \frac{\partial k}{\partial k_i}\,k_j\right) = \frac{1}{k}\,(\delta_{ij} - m_i m_j).$$

Înlocuind aceste expresii în (56.26), obţinem *

$$w_i = v m_i + (\delta_{ij} - m_i m_j)\frac{\partial}{\partial m_j}, \qquad \boldsymbol{w} = v\boldsymbol{m} + (\mathbf{I} + \boldsymbol{m}\boldsymbol{m})\cdot\frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{m}}. \tag{56.27}$$

---

* Contradicţia aparentă dintre formula (56.27) şi formula găsită de F. I. Fiodorov (1965, p. 140), $\boldsymbol{w} = \partial v/\partial \boldsymbol{m}$, se explică prin faptul că în aceasta din urmă derivarea în raport cu $\boldsymbol{m}$ se face fără a se ţine cont de faptul că $\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{m} = 1$, iar în (56.27) se ţine cont de această condiţie.

Prin urmare, vectorul vitezei radiale, $\boldsymbol{w}$, apare sub forma unei sume, unul dintre termeni fiind vectorul viteză de fază, $\boldsymbol{v} = v\boldsymbol{m}$, iar celălalt reprezintă partea derivatei $\partial v/\partial \boldsymbol{m}$, perpendiculară pe normala de undă $\boldsymbol{m}$ (vezi § 18). Acest rezultat este în perfectă concordanță cu formula (56.15).

Din formula (56.27) rezultă că după direcțiile cărora le corespund puncte staționare ale suprafeței vitezelor (în acestea $\partial v/\partial \boldsymbol{m} = 0$, adică raza vectoare este normală la suprafață), se vor propaga unde ordinare. Ea mai arată totodată că raza se abate față de normala de undă cu atît mai mult cu cît variația vitezei de fază, v, cu direcția este mai rapidă, abaterea făcîndu-se către direcția în care viteza crește. Prin urmare, vectorii vitezelor radiale „se concentrează" în direcțiile după care pînzele corespunzătoare ale suprafeței vitezelor sînt cel mai îndepărtate de centru.

Punctele staționare de pe suprafața vitezelor de fază a zincului (fig. 56.5, *a*) există nu numai la pol și pe ecuator, ci și între ele (pe pînza undelor cvasitransversale, T_2). Figura 56.6 demonstrează că deviația razei respective față de direcția normalei de undă devine într-adevăr egală cu zero pentru 37°, astfel încît unda T_2 va fi după această direcție o undă ordinară. Pe suprafața vitezelor de fază a berilului (fig. 56.7, *a*) punctele staționare ce nu sînt în pol sau pe ecuator există nu numai pe pînza undelor cvasitransversale (T_2), ci și pe pînza undelor cvasilongitudinale (L), figura 56.8, *a* arătîndu-ne într-adevăr că deviația razelor L și T_2 se anulează pentru unghiurile corespunzătoare, așa cum cere teoria. Pe de altă parte, unda cvasilongitudinală devenind pur longitudinală, devine totodată o undă ordinară, adică odată cu anularea deviației vectorului polarizării undei cvasilongitudinale de la normala de undă devine zero și deviația razei față de normala de undă (graficele din figura 56.8, *a* și *b* sînt probabil trasate insuficient de exact, însă în figura 56.14 aceasta apare foarte pregnant).

În figurile ce reprezintă secțiunile suprafețelor vitezelor de fază ale cristalelor cubice cu planurile {001} — figurile 56.9, *a* și 56.10, *a* — cercurile definesc planul {001} ca fiind izotrop pentru undele transversale, polarizate perpendicular pe acest plan. Punctele staționare de pe secțiunile suprafețelor vitezelor de fază cu planurile {001} (figurile 56.9, *a* și 56.10, *a*) și $\{1\bar{1}0\}$ (fig. 56.9, *d*) corespund undelor ordinare. Figurile arată că după direcțiile ⟨001⟩ și ⟨110⟩ sînt ordinare toate undele, după cum cere teoria, iar în direcțiile ⟨111⟩ sînt toate numai longitudinale. În secțiunea $\{1\bar{1}0\}$ se observă direcțiile care nu sînt definite prin simetria cristalului și după care se propagă, de asemenea, unde ordinare

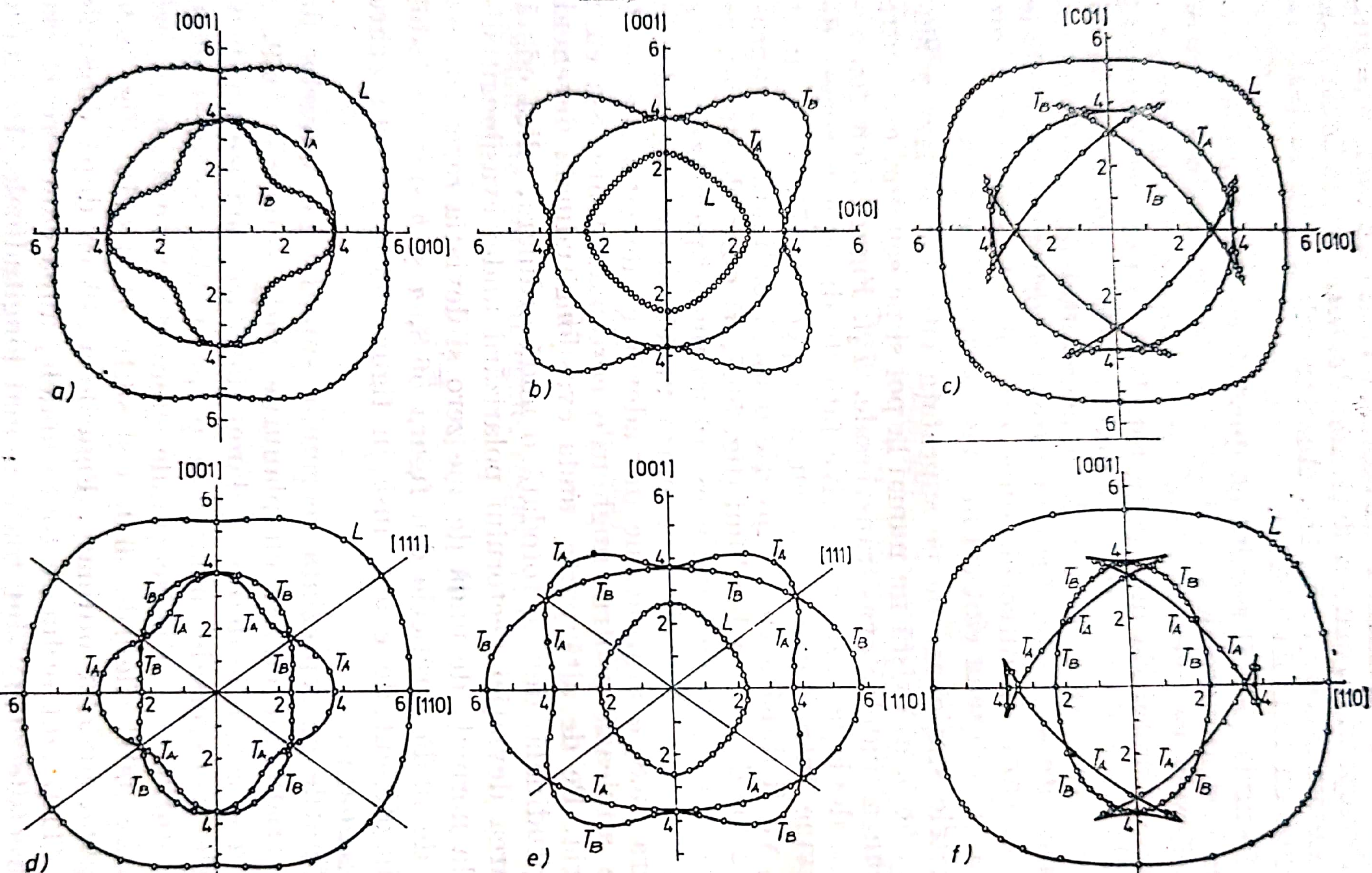


Fig. 56.9. Suprafețele vitezelor de fază (*a* și *d*), ale vitezelor inverse înmulțite cu c_{44}/ρ (*b* și *e*) și ale vitezelor radiative (*c* și *f*) pentru cristalul de nichel, clasa $m3m$; *a, b, c* — secțiunile cu planul (100) ; *d, e, f* — secțiunile cu planul (110) ; *L* — unde longitudinale ; T_A — unde transversale, T_B — unde cvasitransversale ; în km/s (Miller și Musgrave, 1956).

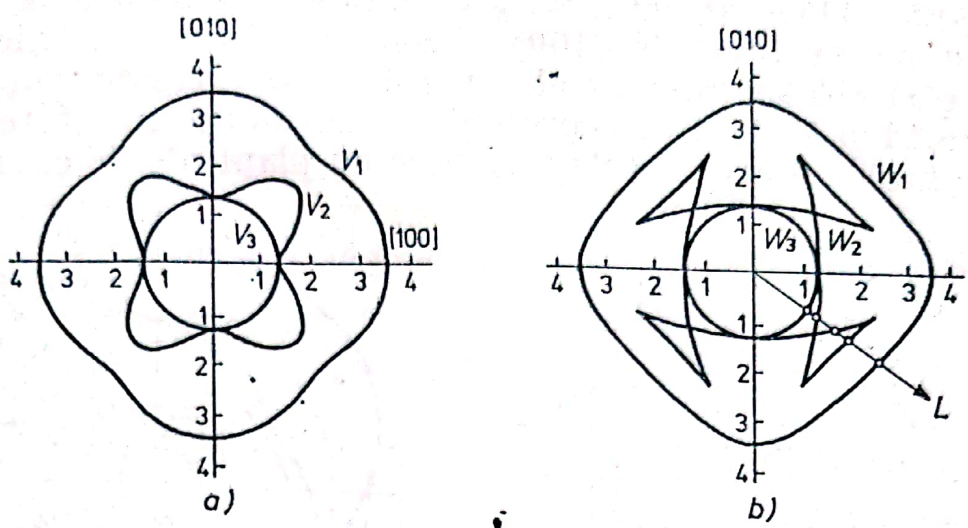


Fig. 56.10. Secțiunile suprafețelor vitezelor de fază (*a*) și ale vitezelor radiative (*b*) pentru cristalul de KBr, clasa *m3m*, cu planul (001). *L* — direcția razei căreia îi corespund cinci unde avînd normalele diferite (v. fig. 56.11); în km/s (Aleksandrov, 1958).

(transversale, $\boldsymbol{p} \| \langle 110 \rangle$). Compararea figurilor 56.9, *a* și 56.10, *a* arată influența semnului anizotropiei (vezi § 52) asupra caracterului suprafeței vitezelor: în cazul cristalului de nichel coeficientul

$$C_N^{\{4\}} = \frac{2}{5}(c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) < 0$$

și corespunzător cu aceasta

$$A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}} > 1;$$

pentru cristalul de KBr $C_N^{\{4\}} > 0$ și $A < 1$. Pentru $C_N^{\{4\}} > 0$, viteza undelor longitudinale este maximă după direcțiile $\langle 100 \rangle$ și minimă

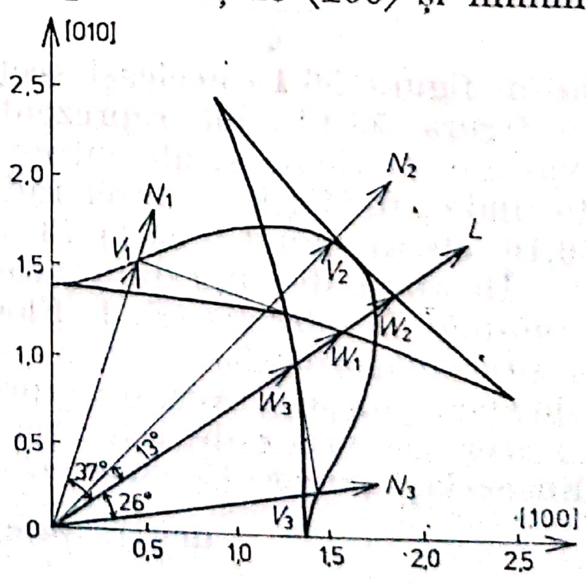


Fig. 56.11. Secțiunile suprafețelor vitezelor de fază și radiative pentru undele cvasitransversale care se propagă și care sînt polarizate în planul (001) pentru cristalul de KBr. *L* — direcția razei; w_1, w_2, w_3 — vitezele radiative pentru trei asemenea unde care se propagă după direcția *L*; v_1, v_2, v_3 — vitezele lor de fază (normale); în km/s (Aleksandrov, 1958).

în direcțiile ⟨111⟩, iar pentru $C_N < 0$, viteza undelor longitudinale este minimă în direcțiile ⟨100⟩ și maximă după direcțiile ⟨111⟩; se pot găsi relativ ușor și alte regularități asemănătoare. În figurile 56.12 și 56.13 sînt reprezentate secțiunile suprafețelor vitezelor de fază a două cristale trigonale cu planurile de coordonate,

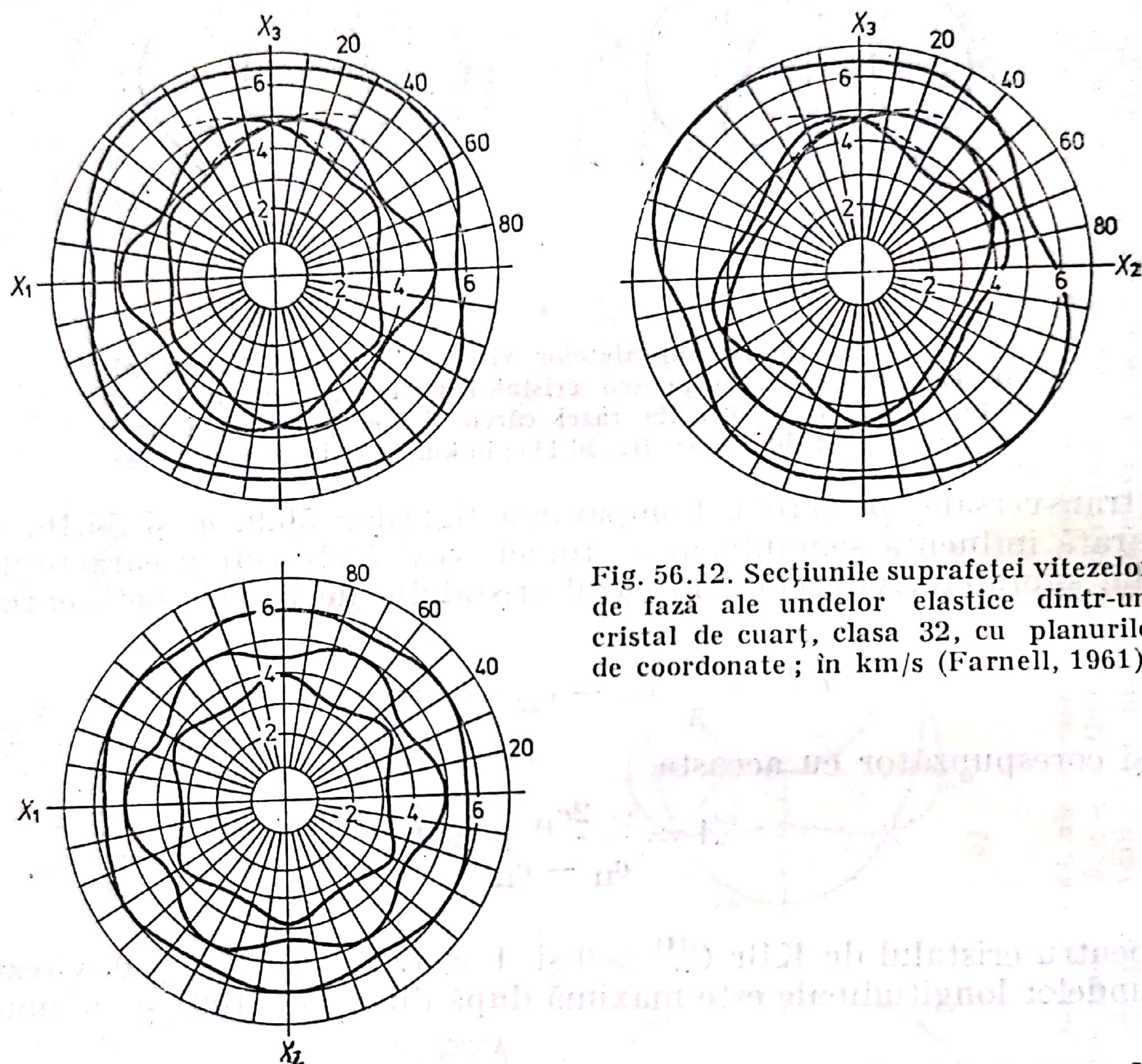


Fig. 56.12. Secțiunile suprafeței vitezelor de fază ale undelor elastice dintr-un cristal de cuarț, clasa 32, cu planurile de coordonate; în km/s (Farnell, 1961).

iar în figura 56.15 aceleași secțiuni pentru un cristal tetragonal. În figura 56.14 sînt reprezentate deviațiile polarizării undelor cvasilongitudinale și ale vitezei radiale față de direcția normalei de undă; deviațiile vitezei radiale sînt reprezentate și în figura 56.16, ele ajungînd pînă la 73° (v. fig. 56.16, *b*).

În afară de suprafața vitezelor de fază se mai folosește și *suprafața de refracție* (F. I. Fiodorov, 1965); ea mai este numită și *suprafața vitezelor inverse* sau *suprafața „micșorării vitezelor"* (slowness surface). Aceasta reprezintă locul geometric al vîrfurilor tuturor vectorilor de refracție posibili, $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{m}/v$, care sînt duși din același punct. Ecuația ei,

$$\det \|c_{ijkl} n_j n_k - \rho \delta_{il}\| = 0, \tag{56.28}$$

Fig. 56.13. Secţiunile suprafeţelor de fază ale undelor elastice în cristalul de bismut, clasa $\bar{3}m$, cu planurile de coordonate ale sistemului cristalofizic. Liniile întrerupte corespund undelor cvasilongitudinale, liniile punctate şi cele desenate cu linie-punct corespund undelor cvasitransversale ; A — direcţia normalei longitudinale ; în km/s (Pace şi Saunders, 1971).

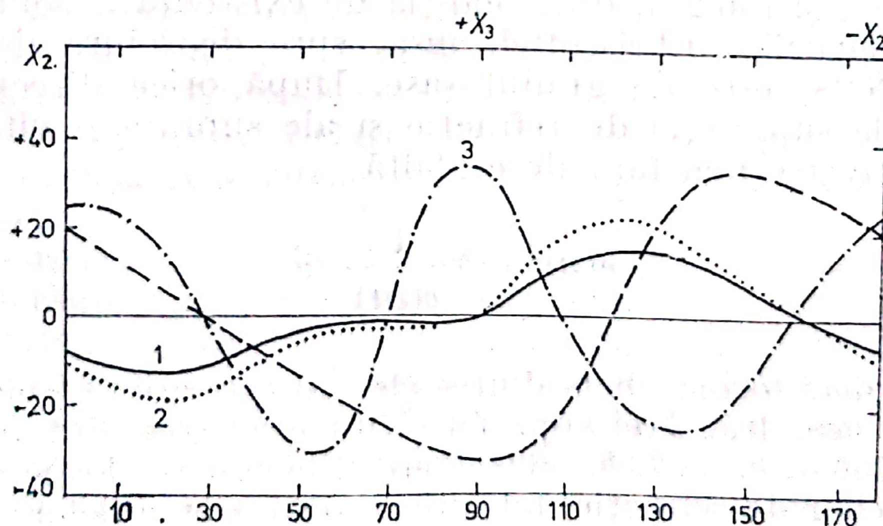


Fig. 56.14. Deviaţia (în grade) a vectorului de polarizare a undei cvasilongitudinale (1) şi a vectorilor radiali ai undei cvasilongitudinale (2) şi ai undelor cvasilongitudinale (3 şi 4), faţă de direcţia vectorului normalei de undă, pentru undele care se propagă în planul de simetrie X_1X_2 (de comparat cu figura 56.13) pentru cristalul de bismut (Pace şi Saunders, 1971).

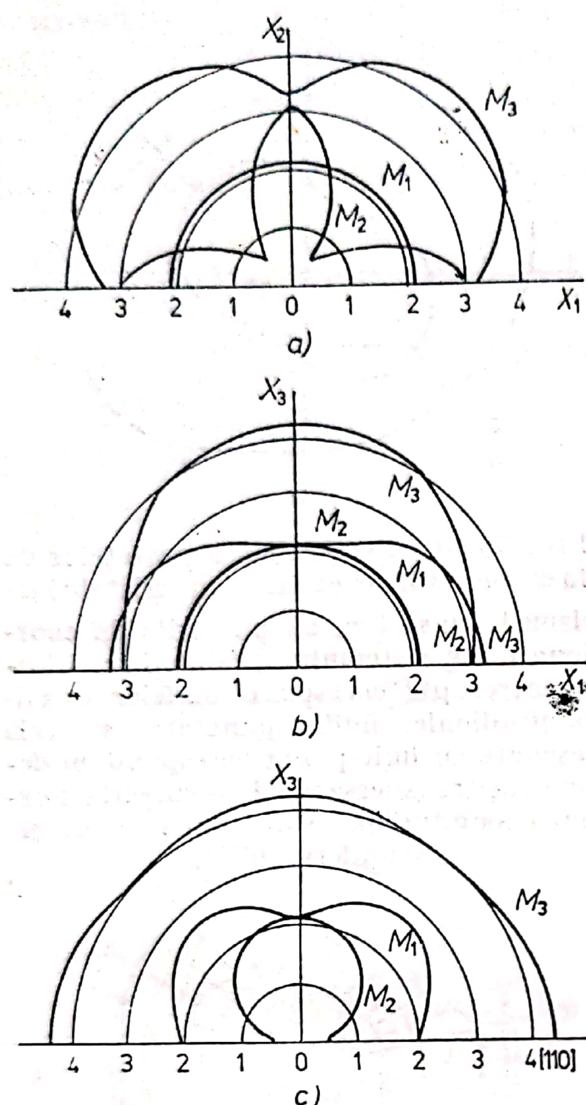


Fig. 56.15. Secţiunile suprafeţei vitezelor de fază ale undelor elastice într-un cristal de paratelurit TeO_2, clasa 422: a) cu planul (001); b) cu planul (010); c) cu planul $(1\bar{1}0)$; în km/s (Ohmachi, Uchida, Niizechi, 1972).

se obţine, ca şi (56.25), din condiţia de existenţă a soluţiilor nenule ale ecuaţiilor Christoffel, însă, spre deosebire de (56.25), ecuaţia (56.28) este de gradul şase. După orice direcţie, razele vectoare ale suprafeţei de refracţie şi ale suprafeţei vitezelor de fază sînt inverse una faţă de cealaltă

$$n(\boldsymbol{m}) = \frac{1}{v(\boldsymbol{m})} \quad ;$$

cunoscînd deci forma uneia dintre ele, nu este greu să ne-o imaginăm şi pe cealaltă. Trei suprafeţe dintre acestea sînt prezentate în figurile 56.5, *b*, 56.7, *b*, 56.9, *b* etc. Ele sînt analoage cu suprafeţele indicilor de refracţie, folosite în optica cristalelor.

Dacă dintr-un punct oarecare *O* se duc toţi vectorii posibili ai vitezei radiale, *w*, atunci vîrfurile lor formează *suprafaţa vitezelor radiale*. Ea se mai numeşte şi *suprafaţa de undă*, deoarece după cum rezultă din definiţia sa este locul geometric al punctelor

pînă la care ajunge simultan unda acustică emisă de o sursă punctuală, aflată în punctul O. Deci normala la suprafaţa de undă este normala de undă, iar un plan tangent la ea este planul frontului de undă. Perpendiculara la planul tangent, dusă din punctul O, reprezintă vectorul viteză de fază, $\boldsymbol{v}$. Dacă se construiesc planurile

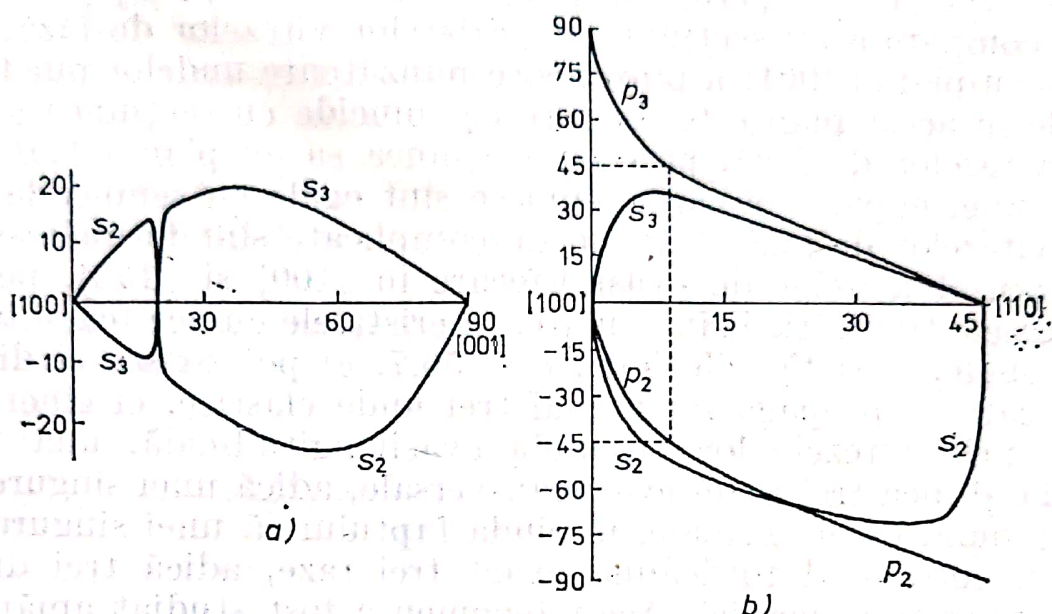


Fig 56.16. Deviaţia (în grade) a vectorului de polarizare, p, şi a razei $\boldsymbol{s}$, faţă de normala de undă în paratelurit : a) în planul (001) ; b) în planul $(1\bar{1}0)$. Indicii corespund figurii 56.11. După Ohmachi, Uchida, Niizechi, 1972.

tangente în fiecare punct al suprafeţei de undă, atunci capetele perpendicularelor duse pe ele din centrul suprafeţei de undă vor alcătui suprafaţa vitezelor ; aceasta înseamnă că suprafaţa vitezelor este ponderala suprafeţei de undă. În direcţiile în care se propagă undele ordinare pînzele corespunzătoare suprafeţei de undă şi suprafeţei vitezelor se ating astfel încît raza vectoare este normala lor comună. Relaţia dintre cele două suprafeţe — a vitezelor de fază şi a vitezelor radiale — este reprezentată în figura 56.11.

În acustica cristalelor nu există relaţiile de dualitate, atît de caracteristice pentru optica cristalelor (v. § 36) (în general, despre analogia dintre acustica cristalelor şi optica cristalelor se pot vedea date în K. S. Aleksandrov, 1956, şi Henneke şi Green, 1969). Aceasta se manifestă mai ales prin faptul că ecuaţia suprafeţei vitezelor radiale este considerabil mai complicată decît ecuaţiile suprafeţei vitezelor de fază, (56.25) şi a suprafeţei de refracţie, (56.28) : gradul acestei ecuaţii şi deci ordinul suprafeţei ajunge pînă la 150 (F. I. Fiodorov, 1965). Corespunzător este mai complicată şi suprafaţa însăşi. Pe ea, spre deosebire de suprafaţa vitezelor, pe lîngă punctele şi liniile de autointersecţie (ieşirile axelor

acustice) pot exista frîngeri (linii de întoarcere). Deocamdată au fost cercetate numai secţiunile acestor suprafeţe cu planurile de simetrie (F. I. Fiodorov, 1965). Pentru cristalele hexagonale ele sînt reprezentate în figurile 56.5, *c* şi 56.7, *c*.

Secţiunile suprafeţelor vitezelor radiale ale cristalelor cubice cu planurile {100} şi {110} sînt date în figurile 56.9, *c* şi *f* şi 56.10, *b*. Să le comparăm cu secţiunile suprafeţelor vitezelor de fază. Secţiunea cu planul {001} a pînzei corespunzătoare undelor pur transversale în acest plan este un cerc ce coincide cu secţiunea suprafeţei vitezelor de fază, pe cînd secţiunea sa cu planul {110} are forma unei elipse, ale cărei semiaxe sînt egale cu semiaxele ovalului vitezelor de fază. Extrem de complicate sînt formele secţiunilor pînzei undelor de cvasiforfecare în {100} şi {110}, pe care apar discontinuităţi. Prin urmare, în cristalele cubice (ca şi în cele hexagonale, vezi figurile 56.5, *c* şi 56.7, *c*) pot exista şi direcţii după care se propagă nu numai trei unde elastice, ci cinci, care diferă prin vitezele lor : o undă cvasilongitudinală, una transversală şi încă trei unde cvasitransversale, adică unei singure raze îi corespund cinci normale, în ciuda faptului că unei singure normale îi corespund totdeauna exact trei raze, adică trei direcţii de propagare a energiei. Acest fenomen a fost studiat amănunţit (v. fig. 56.11), fiind verificat experimental de K. S. Aleksandrov (1965) pe cristalul de KBr.

Asupra reflexiei şi refracţiei undelor acustice pe suprafaţa unui cristal v. F. I. Fiodorov (1965) şi K. S. Aleksandrov (1962).

În general, pentru teoria elasticităţii cristalelor şi a problemelor înrudite se pot consulta lucrările: Goldenblat (1969); Iliuşin (1971); Landau şi Lifşiţ (1965); Leibfried (1963); Lehniţki (1950); Lure (1955, 1970); Perelomova (1971); Sedov (1962 şi 1970); F. I. Fiodorov (1965); Musgrave (1970).

CAPITOLUL 7

TERMODINAMICA CRISTALELOR

§ 57. ENERGIA INTERNĂ ȘI POTENȚIALUL TERMODINAMIC AL CRISTALULUI

Lucrul efectuat asupra unității de volum al unui cristal de către un cîmp electric și de către tensiunile mecanice este egal, respectiv cu

$$\delta R_{\text{el}} = \frac{1}{4\pi} E_i \mathrm{d} D_i = \frac{1}{4\pi} \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{D},$$

$$\delta R_{\text{mec}} = \sigma_{ij} \mathrm{d}\, \varepsilon_{ij} = \sigma_\lambda \mathrm{d}\, \varepsilon_\lambda = \boldsymbol{\sigma} : \mathrm{d}\boldsymbol{\varepsilon}. \tag{57.1}$$

Dacă se introduce vectorul $\widetilde{\boldsymbol{D}} = \boldsymbol{D}/4\pi$ pentru a da aceeași formă formulelor, atunci variația totală a energiei interne a unității de volum a unui cristal supus unor acțiuni termice, mecanice și electrice infinit mici, se va putea scrie sub forma

$$\mathrm{d}U = T\mathrm{d}S + E_i \mathrm{d}\widetilde{D}_i + \sigma_\lambda \mathrm{d}\, \varepsilon_\lambda \tag{57.2}$$

(T fiind temperatura absolută, iar S entropia unității de volum).

Din punct de vedere strict formal, expresia (57.2) nu este corectă. În realitate, un corp solid în care tensiunile nu se reduc la o întindere în toate direcțiile, nu este în stare de echilibru termodinamic. Într-adevăr, cu trecerea timpului corpul se poate recristaliza, dar toate tensiunile, în afară de întinderea în toate direcțiile dispar; abia acum se va ajunge la un echilibru termodinamic deplin. Deoarece durata stabilirii echilibrului este peste măsură de mare, de foarte multe ori sîntem obligați să avem de a face cu corpuri solide în care acest echilibru nu a reușit încă să se stabilească. Formula (57.2) permite descrierea tocmai a unor astfel de corpuri.

Entropia, inducția electrică, componentele deformației s-a convenit să fie numite *coordonate termodinamice generalizate*, pe cînd temperatura, intensitatea cîmpului electric, tensiunile mecanice — *forțe termodinamice generalizate*.

Vom introduce notaţiile

S	$\widetilde{D}_1$	$\widetilde{D}_2$	$\widetilde{D}_3$	ε_1	ε_2	ε_3	ε_4	ε_5	ε_6
x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9
T	E_1	E_2	E_3	σ_1	σ_2	σ_3	σ_4	σ_5	σ_6
X_0	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7	X_8	X_9

În aceste notaţii, diferenţiala totală a energiei interne, (57.2), va căpăta forma

$$\mathrm{d}U = X_A \mathrm{d}x_A \tag{57.3}$$

(aici şi în continuare, literele $A, B, C, \ldots$ parcurg valorile $0, 1, \ldots$ $\ldots, 9$). Mărimile X_A şi x_A pot fi considerate componente ale unor vectori în spaţiul cu 10 dimensiuni; în acest caz, combinaţia $X_A \mathrm{d}x_A$ capătă sensul de produs scalar.

Formula (57.3) permite să numim energia internă potenţialul termodinamic în raport cu coordonatele generalizate, dat fiind că oricare dintre forţele generalizate va fi egală cu derivata energiei interne în raport cu coordonata generalizată corespunzătoare

$$X_A = \frac{\partial U}{\partial x_A} \tag{57.4}$$

cînd celelalte coordonate generalizate se consideră constante, adică energia internă se consideră funcţie de coordonatele generalizate şi nu de orice alte variabile. Drept variabile independente este însă mai comod să se folosească nu coordonatele generalizate, ci forţele generalizate: în cadrul efectuării unei experienţe în condiţii obişnuite, putem regla variaţia temperaturii, a intensităţii cîmpului electric, a tensiunilor mecanice; din contra, variaţia entropiei, a inducţiei electrice, a deformaţiilor este dificil de reglat nemijlocit.

Potenţialul termodinamic în raport cu forţele generalizate este reprezentat de funcţia

$$\Phi = U - TS - E_i \widetilde{D}_i - \sigma_\lambda \varepsilon_\lambda = U - X_A x_A, \tag{57.5}$$

a cărei diferenţială totală exactă este egală cu

$$\mathrm{d}\Phi = -S\mathrm{d}T - \widetilde{D}_i \mathrm{d}E_i - \varepsilon_\lambda \mathrm{d}\sigma_\lambda = -x_A \mathrm{d}X_A\,; \tag{57.6}$$

ea se numește *potențial termodinamic* (în sensul strict al cuvîntului) sau *energia liberă Gibbs*. Dacă ea este considerată funcție de forțele generalizate, atunci orice coordonată generalizată va fi egală cu

$$x_A = -\frac{\partial \Phi}{\partial x_A}. \tag{57.7}$$

Să dezvoltăm această expresie într-o serie Taylor, în vecinătatea unui punct oarecare $X_B = X_B^{(0)}$, cu alte cuvinte, a unei stări inițiale oarecare a cristalului, definită prin valori bine determinate $X_B^{(0)}$ ale forțelor termodinamice generalizate, oprindu-ne la termenii de ordinul întîi

$$x_A = -\frac{\partial \Phi}{\partial x_A} = -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial X_A}\right)_0 - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_A \partial X_B}\right)_0 (X_B - X_B^{(0)}) - \ldots \tag{57.8}$$

Aici

$$-\left(\frac{\partial \Phi}{\partial X_A}\right)_0 = x_A^{(0)}$$

este valoarea coordonatei termodinamice generalizate respective, a cristalului în starea inițială, cînd toate forțele termodinamice generalizate sînt egale cu $X_B^{(0)}$, iar

$$-\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_A \partial X_B}\right)_0$$

este valoarea derivatei acestei coordonate termodinamice în aceleași condiții.

Drept stare inițială a cristalului este convenabil să se ia o stare fără tensiuni (cu toți $\sigma_\lambda = 0$) și în absența cîmpului electric (toți $E_i = 0$). Așadar, dintre valorile inițiale ale forțelor termodinamice generalizate diferită de zero este numai $X_0^{(0)} = T_0$ — temperatura inițială a cristalului. Vom conveni să considerăm că în starea inițială cristalul nu este deformat și nici polarizat — aceasta înseamnă, de fapt, că temperatura T_0 se ia ca origine a măsurării deformărilor termice și a polarizărilor piroelectrice (polarizarea spontană fiind omisă în acest caz: pentru piroelectricii obișnuiți, datorită motivelor examinate în § 31, iar pentru seignettoelectrici, deoarece aproximația considerată aici este insuficientă pentru aceștia). Să notăm abaterile temperaturii și entropiei de la valorile inițiale cu

$$T - T_0 = \Theta, \; S - S_0 = \Sigma$$

şi să introducem, în afară de x_A şi X_A, mărimile

$$y_A = \begin{cases} \Sigma \text{ pentru } A = 0, \\ x_A \text{ pentru } A = 1, \ldots, 9; \end{cases} \qquad Y_A = \begin{cases} \Theta \text{ pentru } A = 0, \\ X_A \text{ pentru } A=1, \ldots, 9. \end{cases}$$

Dezvoltările (57.8) se vor scrie acum în forma

$$y_A = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial Y_A \partial Y_B}\right)_0 Y_B = M_{AB} Y_B, \tag{57.9}$$

unde

$$M_{AB} = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial Y_A \partial Y_B}\right)_0 = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial X_A \partial X_B}\right)_0$$

sînt valorile derivatelor respective, cînd toţi $Y_B = 0$.

Setul de numere M_{AB} poate fi considerat o matrice de ordinul zece, care transpune mulţimea vectorilor cu zece dimensiuni ai forţelor generalizate Y_A în mulţimea vectorilor tot cu zece dimensiuni, ai coordonatelor generalizate, y_A. Această matrice se numeşte *matricea potenţialului termodinamic* Φ; fiind formată din derivatele de ordinul doi ale acestuia, ea este, evident, simetrică

$$M_{AB} = M_{BA}. \tag{57.10}$$

O scriere mai detaliată a dezvoltărilor (57.9) este

$$\Sigma = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial T^2}\right)_0 \Theta - \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial T \partial E_k}\right)_0 E_k - \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial T \partial \sigma_\mu}\right)_0 \sigma_\mu,$$

$$\widetilde{D}_i = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial E_i \partial T}\right)_0 \Theta - \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial E_i \partial E_k}\right)_0 E_k - \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial E_i \partial \sigma_\mu}\right)_0 \sigma_\mu, \tag{57.11}$$

$$\varepsilon_\lambda = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial \sigma_\lambda \partial T}\right)_0 \Theta - \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial \sigma_\lambda \partial E_k}\right)_0 E_k - \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial \sigma_\lambda \partial \sigma_\mu}\right)_0 \sigma_\mu.$$

Pentru a elucida sensul fizic al derivatei $(\partial^2\Phi/\partial T^2)_0$, vom calcula variaţia entropiei unităţii de volum a unui cristal, la o creştere a temperaturii cu $\Theta°$, în absenţa cîmpului electric şi a tensiunilor mecanice

$$\Sigma = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial T^2}\right)_0 \Theta.$$

În acest caz, unitatea de volum a cristalului va primi cantitatea de căldură

$$Q = C_p\Theta,$$

unde C_p este căldura specifică a cristalului raportată la unitatea de volum, cînd cîmpul electric rămîne constant și tensiunile mecanice sînt constante. Pe de altă parte, deoarece $\Theta/T \ll 1$ (altfel nu ne-am fi putut limita în dezvoltare numai la primul termen care conține temperatura), această cantitate de căldură este aproximativ egală cu

$$Q = T_0\Sigma.$$

Comparînd aceste expresii, obținem

$$-\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial T^2}\right)_0 = \frac{C_p}{T_0}. \qquad (57.12)$$

Celelalte elemente ale matricei potențialului termodinamic au următoarele denumiri și notații: coeficienții permitivității dielectrice (împărțiți la 4π)

$$\tilde{\varkappa}_{ik} = \frac{1}{4\pi}\varkappa_{ik} = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial E_i\partial E_k}\right)_0, \quad \frac{1}{4\pi}\boldsymbol{\varkappa} = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial \mathbf{E}\,\partial \mathbf{E}}\right)_0; \qquad (57.13)$$

coeficienții deformabilității elastice

$$s_{\lambda\mu} = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial\sigma_\lambda\partial\sigma_\mu}\right)_0, \quad \mathbf{s} = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial\boldsymbol{\sigma}\,\partial\boldsymbol{\sigma}}\right)_0; \qquad (57.14)$$

coeficienții piroelectrici

$$p_i = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial E_i\,\partial T)}\right)_0, \quad \mathbf{p} = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial \mathbf{E}\,\partial T}\right)_0; \qquad (57.15)$$

coeficienții dilatării termice

$$\alpha_\lambda = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial\sigma_\lambda\partial T}\right)_0, \quad \boldsymbol{\alpha} = -\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial\boldsymbol{\sigma}\,\partial T}\right)_0 \qquad (57.16)$$

şi, în fine, coeficienţii piezoelectrici

$$d_{i\mu} = -\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial E_i \, \partial \sigma_\mu}\right)_0, \qquad \mathbf{d} = -\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \boldsymbol{E}, \ \partial \boldsymbol{\sigma}}\right)_0. \tag{57.18}$$

Toţi aceşti coeficienţi, în afara celor piezoelectrici, care vor fi studiaţi în § 58, au fost deja întîlniţi în capitolele precedente.

Matricea potenţialului termodinamic, M, se exprimă prin aceşti coeficienţi în felul următor

$$M = \left\Vert \begin{matrix} C_p/T_0 & p_1 & p_2 & p_3 & \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 & \alpha_6 \\ p_1 & \tilde{\varkappa}_{11} & \tilde{\varkappa}_{12} & \tilde{\varkappa}_{31} & d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ p_2 & \tilde{\varkappa}_{12} & \tilde{\varkappa}_{22} & \tilde{\varkappa}_{23} & d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ p_3 & \tilde{\varkappa}_{31} & \tilde{\varkappa}_{23} & \tilde{\varkappa}_{33} & d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \\ \alpha_1 & d_{11} & d_{21} & d_{31} & s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & s_{15} & s_{16} \\ \alpha_2 & d_{12} & d_{22} & d_{32} & s_{12} & s_{22} & s_{23} & s_{24} & s_{25} & s_{26} \\ \alpha_3 & d_{13} & d_{23} & d_{33} & s_{31} & s_{23} & s_{33} & s_{34} & s_{35} & s_{36} \\ \alpha_4 & d_{14} & d_{24} & d_{34} & s_{14} & s_{24} & s_{34} & s_{44} & s_{45} & s_{64} \\ \alpha_5 & d_{15} & d_{25} & d_{35} & s_{15} & s_{25} & s_{35} & s_{45} & s_{55} & s_{56} \\ \alpha_6 & d_{16} & d_{26} & d_{36} & s_{16} & s_{26} & s_{36} & s_{64} & s_{56} & s_{66} \end{matrix} \right\Vert .$$

Acum, expresiile (57.11) se scriu în formă definitivă astfel

$$\Sigma = (C_p/T_0)\,\Theta + p_k E_k + \sigma_\mu \sigma_\mu, \tag{57.18, a}$$

$$\tilde{D}_i = p_i \Theta + \tilde{\varkappa}_{ik} E_k + d_{i\mu}\, \sigma_\mu, \tag{57.18, b}$$

$$\varepsilon_\lambda = \alpha_\lambda \Theta + d_{k\lambda} E_k + s_{\lambda\mu}\, \sigma_\mu, \tag{57.18, c}$$

sau, în forma fără coordonate,

$$\Sigma = (C_p/T_0)\,\Theta + \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{E} + \boldsymbol{\alpha} : \boldsymbol{\sigma}, \tag{57.18, a'}$$

$$\tilde{\boldsymbol{D}} = \boldsymbol{p}\Theta + \tilde{\boldsymbol{\varkappa}} \cdot \boldsymbol{E} + \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma}, \tag{57.18, b'}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\alpha}\Theta + \boldsymbol{E} \cdot \mathbf{d} + \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}. \tag{57.18, c'}$$

Expresia (57.18,b) pentru $\sigma = 0$ trece în ecuaţia de material a electrostaticii*, iar relaţia (57.18,c), pentru $\boldsymbol{E} = 0$, în legea Hooke cu termenii care conţin temperatura. Din faptul că matricea potenţialului termodinamic este simetrică, rezultă, prin urmare, simetricitatea tensorului permitivităţii dielectrice

$$\varkappa_{ik} = \varkappa_{ki} \tag{57.19}$$

şi a coeficienţilor deformabilităţii elastice

$$s_{\lambda\mu} = s_{\mu\lambda}, \quad s_{ijkl} = s_{klij}. \tag{57.20}$$

În forma completă — pentru $\boldsymbol{E} \neq 0$ şi $\sigma \neq 0$ — formulele (57.18,b) şi (57.18,c) arată că există posibilitatea ca inducţia electrică să depindă de tensiunile mecanice, iar tensorul deformaţiilor, de intensitatea cîmpului electric, aşa că ambele dependenţe pot fi determinate printr-un singur set al coeficienţilor $d_{i\mu}$. De ele sînt legate efectul piezoelectric şi, respectiv, efectul piezoelectric invers, expuse în § 58.

Formula (57.18,a) arată că entropia unui cristal poate să depindă nu numai de temperatură, ci şi de cîmpul electric şi de tensiunile mecanice, iar din faptul că matricea M este simetrică rezultă că această dependenţă este determinată cu ajutorul coeficienţilor piroelectrici şi, respectiv, al coeficienţilor de dilatare termică. Astfel, sub acţiunea unui cîmp electric $\boldsymbol{E}$, entropia unităţii de volum a unui cristal piroelectric variază cu

$$\Sigma = p_k E_k = \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E}. \tag{57.21}$$

Prin urmare, unitatea de volum a unui cristal absoarbe din mediul înconjurător cantitatea de căldură

$$Q = T_0\Sigma = T_0\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E}. \tag{57.22}$$

Cuvîntul „absoarbe" este utilizat aici convenţional. Dacă unghiul dintre vectorii $\boldsymbol{p}$ şi $\boldsymbol{E}$ este mai mic de 90°, cantitatea de căldură este, într-adevăr, absorbită, dacă însă acest unghi este mai mare ca 90° ea va fi cedată de către cristal mediului înconjurător. Fenomenul descris poartă numele de efect *electrocaloric*.

---

* Aici lipseşte termenul $\widetilde{\boldsymbol{D}}^{(0)} = \boldsymbol{P}^{(0)}$, care caracterizează polarizarea spontană a cristalelor piroelectrice. Am văzut deja în capitolul 3 că influenţa polarizării spontane practic este complet neutralizată datorită conductibilităţii finite a cristalului, pe de o parte, şi depunerii de ioni din aer pe suprafeţele încărcate ale cristalului, pe de alta. Considerarea acestui termen nu prezintă deci interes practic. Efectul piroelectric este însă inclus în studiu.

Efectul electrocaloric poate apărea și în alte condiții. Fie, la fel ca mai înainte, să nu existe tensiuni mecanice, iar schimbul de căldură cu mediul înconjurător să fie exclus. Este firesc să presupunem că în aceste condiții temperatura cristalului, care se află într-un cîmp electric, să varieze. Și într-adevăr, formula (57.18,a) capătă în acest caz forma

$$0 = (C_p/T_0)\,\Theta + \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E},$$

deoarece condiția de izolare termică, pentru procesul invers, se reduce la $\Sigma = 0$. De aici, obținem că variația temperaturii este

$$\Theta = -\,(T_0/C_p)\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E}. \tag{57.23}$$

Dacă cîmpul electric este orientat după vectorul coeficienților piroelectrici, cristalul aflat în cîmp electric se răcește; în caz contrar, cristalul se încălzește. Acest fapt este, desigur, în deplină concordanță cu comportarea reală a unui cristal ce se află în condiții izotermice.

Să continuăm examinarea egalității (57.18,a). Luînd toate măsurile necesare ca din experiență să lipsească cîmpul electric (sau mai simplu, luînd un cristal nepiroelectric) aplicăm cristalului eforturile mecanice $\boldsymbol{\sigma}$. Dacă procesul este izotermic, cristalul absoarbe cantitatea de căldură

$$Q = T_0\alpha_\mu\sigma_\mu = T_0\boldsymbol{\alpha} : \boldsymbol{\sigma}. \tag{57.24}$$

Căldura este într-adevăr absorbită numai în cazul în care tensiunile sînt orientate în aceeași direcție cu deformațiile termice, fiind însă cedată mediului înconjurător în caz contrar. În condiții de izolație termică, variația temperaturii cristalului, supus acțiunii tensiunilor mecanice, este egală cu

$$\Theta = -\,(T_0/C_p)\alpha_\mu\sigma_\mu = -\,(T_0/C_p)\,\boldsymbol{\alpha} : \boldsymbol{\sigma}. \tag{57.25}$$

Dacă tensiunile sînt îndreptate în aceeași direcție cu deformațiile termice, cristalul se răcește, iar în caz contrar el se încălzește. Fenomenele descrise se numesc *efect piezocaloric*.

Majoritatea cristalelor își măresc dimensiunile liniare odată cu creșterea temperaturii: $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{n} > 0$ ($\boldsymbol{n}$ — vectorul unitar). Aici orice tensiune de întindere, $\boldsymbol{\sigma} = \sigma\boldsymbol{nn}$ provoacă o răcire a cristalului izolat termic, pe cînd o tensiune de comprimare, o încălzire a lui. Cristalul de calcit însă, ale cărui dimensiuni liniare în

planul bazei se micşorează la încălzire (v. fig. 24.3), sub acţiunea unor tensiuni de întindere în planul bazei se încălzeşte, pe cînd sub acţiunea unor tensiuni de comprimare se răceşte. Tensiunile de întindere şi de comprimare, orientate de-a lungul axei optice a cristalului, duc însă la rezultate contrare.

§ 58. EFECTUL PIEZOELECTRIC ŞI SIMETRIA LUI

Studiul energiei interne şi al potenţialului termodinamic al unui cristal (§ 57) a explicat posibilitatea polarizării electrice a cristalului sub acţiunea unui cîmp electric. Dacă în formulele (57.18,b) şi (57.18,c) se păstrează numai termenii care descriu aceste fenomene, obţinem

$$D_i = 4\pi d_{i\mu}\sigma_\mu, \qquad \varepsilon_\lambda = d_{k\lambda}E_k. \tag{58.1}$$

Prima dintre aceste formule descrie efectul piezoelectric, iar cea de a doua efectul piezoelectric invers. Ambele sînt caracterizate de acelaşi set de coeficienţi, $d_{i\mu}$, care sînt legaţi de tensorul coeficienţilor piezoelectrici,

$$\mathbf{d} = \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial \boldsymbol{E}\,\partial \boldsymbol{\sigma}}\right)_0, \qquad d_{ikl} = \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial E_i\,\partial \sigma_{kl}}\right)_0 \tag{58.2}$$

prin relaţia (v. anexa F)

$$d_{i\mu} = \begin{cases} d_{ikl} & (kl \leftrightarrow \mu = 1,\ 2,\ 3), \\ 2d_{ikl} & (kl \leftrightarrow \mu = 4,\ 5,\ 6). \end{cases} \tag{58.3}$$

Expresiile (58.1) pot fi scrise în forma

$$D_i = 4\pi d_{ikl}\sigma_{kl}, \quad \boldsymbol{D} = 4\pi\mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma}; \tag{58.4}$$

$$\varepsilon_{ij} = d_{kij}E_k, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{E}\cdot\mathbf{d}.$$

Cînd folosim formulele (58.1) şi (58.4) trebuie să fim atenţi la rolul diferiţilor indici. În formulele (58.1) indicele latin al lui $d_{i\mu}$ corespunde mărimilor electrice, fiind scris totdeauna primul; indicele notat cu literă grecească corespunde mărimilor mecanice. În formulele (58.4), primul indice corespunde mărimilor electrice, iar cel de al doilea şi cel de al treilea, mărimilor mecanice. Corespunzător cu aceasta este luată şi ordinea de înmulţire în formulele (58.4).

Tensorul coeficienţilor piezoelectrici, **d**, este un tensor de rangul trei; simetria lui este $V[V^2]$. Ca orice tensor de material de tip impar, el este identic egal cu zero pentru toate cristalele cu centru de simetrie. Prin urmare, în cristalele cu centru de simetrie (şi în general în mediile omogene cu centru de simetrie, independent de structura lor), efectul piezoelectric nu este posibil. Forma pe care o ia tensorul **d** în grupurile cu centru de simetrie poate fi determinată apelînd la metodele expuse în capitolul 5. Rezultatele unei asemenea investigaţii sînt cuprinse în tabelul E.11. O privire de ansamblu asupra acestui tabel arată că tensorul **d** ia valoarea zero în două grupuri punctuale, cu centru de simetrie: în grupul cristalografic 432 şi în grupul limtă $\infty\infty$ (remarcăm că aceasta este o consecinţă a simetriei interne $V[V^2]$ a tensorului **d**; un tensor de rangul trei de formă generală, adică de simetrie internă V^3 nu se anulează în aceste grupuri). În celelalte clase cristalografice şi în trei clase limită efectul piezoelectric este posibil. În cazul determinării numărului de clase cu simetrie piezoelectrică trebuie ţinut seama, fireşte, de teorema lui Hermann; ca urmare a acestei teoreme, simetria proprietăţilor unor cristale (de pildă ale cristalelor din clasele $4mm$ şi $6mm$ şi ale texturilor din clasa ∞m) este aceeaşi. Pe lîngă aceasta se poate arăta că cristalele din clasele 6 şi $\bar{6}m2$ constituie o singură clasă de simetrie piezoelectrică, cu toate că forma tensorului **d** este diferită pentru aceste clase.

O situaţie analoagă am mai întîlnit cu ocazia examinării claselor de simetrie elastică (§ 52), ceea ce ne permite să trecem peste explicaţii detaliate. Forma tensorului **d** pentru cristalele din clasa $\bar{6}$ nu se poate „înrăutăţi" prin nici un fel de rotaţie a sistemului de coordonate în jurul axei X_3, deoarece direcţia axelor X_1 şi X_2 nu este definită în clasa $\bar{6}$ de către elementele de simetrie ale cristalului. Însă rotind sistemul de coordonate în jurul axei X_3 cu un unghi oarecare, putem face ca una dintre cele două componente independente ale tensorului **d** să devină zero şi să-l aducem astfel la forma pe care o are tensorul **d** pentru cristalele clasei $\bar{6}m2$. Aceasta demonstrează că simetria reală a acestui tensor este $\bar{6}m2$.

Este necesar să avem în vedere că apartenenţa unui cristal dat la unele dintre clasele piezoelectrice nu înseamnă deloc că acest cristal are, într-adevăr, proprietăţi piezoelectrice. Sînt cunoscute cristale dielectrice care aparţin claselor piezoelectrice în care nu se manifestă — în experienţe făcute cu suficientă precizie — nici un fel de proprietăţi piezoelectrice. Prin aceasta, piezoelectricitatea nu se deosebeşte de celelalte proprietăţi, ca elasticitatea sau dilatarea termică, pe care le au toate corpurile solide. Invers însă, apartenenţa unui cristal la una dintre clasele nepiezoelectrice constituie o garanţie serioasă a absenţei proprietăţilor piezoelectrice la acel cristal.

Celelalte variante ale efectului piezoelectric sînt permise pentru unele clase piezoelectrice, fiind interzise pentru altele. Așa este, de exemplu, efectul piezoelectric care apare în cazul presiunii hidrostatice, exercitate din toate direcțiile. Din ecuația (58.4), pentru

$$\sigma_{kl} = -p\delta_{kl}$$

obținem

$$D_i = -4\pi d_{ikk}p. \qquad (58.5)$$

Prin urmare, polarizarea piezoelectrică apare în acest caz numai cu condiția ca componentele $d_i = d_{ikk}$ ale vectorului $\boldsymbol{d} = \mathbf{d} : \mathbf{I}$ să fie diferite de zero. Evident, $\boldsymbol{d}$ este un vector de material, iar vectorii de material sînt diferiți de zero numai în cazul în care ei exprimă proprietățile cristalelor din clasele piroelectrice. Din această cauză, efectul descris este posibil numai în 10 clase cristalografice și în două clase limită din numărul de 20 de clase cristalografice și 3 clase limită care permit, în general, efectul piezoelectric (tabelul 58.1).

Tabelul 58.1

Vectorul efectului piezoelectric sub acțiunea presiunii hidrostatice $\boldsymbol{d} = \mathbf{d} : \mathbf{I}$ ($d_i = d_{ikk}$)

Clasele	Vectorul $\boldsymbol{d}$
1	$(d_{11}+d_{12}+d_{13})\mathbf{e}_1 + (d_{21}+d_{22}+d_{23})\mathbf{e}_2 + (d_{31}+d_{32}+d_{33})\mathbf{e}_3$
m ($m \perp \mathbf{e}_2$)	$(d_{11}+d_{12}+d_{13})\mathbf{e}_1 + (d_{31}+d_{32}+d_{33})\mathbf{e}_3$
m ($m \perp \mathbf{e}_3$)	$(d_{11}+d_{12}+d_{13})\mathbf{e}_1 + (d_{21}+d_{22}+d_{23})\mathbf{e}_2$
2 ($2 \parallel \mathbf{e}_2$)	$(d_{21}+d_{22}+d_{23})\mathbf{e}_2$
2 ($2 \parallel \mathbf{e}_3$), $mm2$	$(d_{31}+d_{32}+d_{33})\mathbf{e}_3$
3, 4, 6, ∞, $3m$, $4mm$, $6mm$, ∞m	$(2d_{31}+d_{33})\mathbf{e}_3$

Un al doilea exemplu este în legătură cu experiențele fraților Curie, în care a fost observat efectul piezoelectric : pe o față a unui cristal se așază o greutate, măsurîndu-se, pe aceeași față, densitatea de sarcină, ρ_{sup}. Deoarece starea de tensiune s-a redus la o comprimare într-o singură direcție,

$$\sigma_{kl} = -pn_k n_l$$

($\boldsymbol{n}$ fiind vectorul unitar al normalei la față), rezultă că

$$\rho_{sup} = -\frac{1}{4\pi}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{D} = pd_{ikl}n_i n_k n_l. \qquad (58.6)$$

Evident că în astfel de măsurători apare numai partea simetrică a tensorului d_{ikl} — tensorul efectului piezoelectric longitudinal

$$f_{ikl} = d_{(ikl)} = \frac{1}{3}(d_{ikl} + d_{kli} + d_{lik}). \qquad (58.7)$$

Într-adevăr, $\boldsymbol{n}\cdot\mathbf{d} : \boldsymbol{nn} = \boldsymbol{n}\cdot\mathbf{f} : \boldsymbol{nn}$. Simetria internă a tensorului **f** este $[V^3]$. Spre deosebire de tensorul **d**, acesta are în general numai 10 componente independente, nu 18. Legătura dintre el și tensorul **d** este dată în tabelul 58.2. Coincidența dintre tensorii **f** și **d** în cazul unor cristale arată că pentru cristalele din aceste clase se pot obține toate componentele tensorului **d** din măsurarea efectului piezoelectric longitudinal. În cazurile însă în care tensorii **f** și **d** pentru cristalele dintr-o clasă dată sînt diferiți, determinarea componentelor **d** numai prin astfel de măsurători este, bineînțeles, imposibilă. În clasele piezoelectrice 422, 622, ∞2 efectul piezoelectric longitudinal este interzis. Clasele de simetrie piezoelectrică longitudinală sînt enumerate în tabelul 58.3. Se vede că unele clase cristaline cuprinse în clase de simetrie piezoelectrică diferită intră în aceeași clasă de simetrie piezoelectrică longitudinală. Dintre acestea, deosebit de interesantă este clasa de simetrie piezoelectrică longitudinală $\bar{4}3m$: din ea fac parte cristalele claselor $\bar{4}3m$, 23, $\bar{4}2m$, $\bar{4}$ și 222, care aparțin la trei sisteme diferite. Din clasele enumerate fac parte multe cristale piezoelectrice, importante pentru tehnică. În clasa 222 cristalizează cel mai important cristal piezoelectric-seignettoelectric, sarea Seignette, în clasa $\bar{4}2m$ cristalele deosebit de larg utilizate, de dihidrofosfat de potasiu (KDP) și de dihidrofosfat de amoniu (ADP) precum și întreaga familie izomorfă lor. O deosebită importanță în ultimii ani au căpătat-o semiconductorii piezoelectrici din clasa $\bar{4}3\,m$, cum ar fi sfaleritul, arseniura de galiu, antiminiura de indiu ș.a.

Tensorul efectului piezoelectric longitudinal pentru cristalele acestor clase are doar o singură componentă independentă, fiind multiplu al septorului unitar, $S^\circ[\bar{4}3m]$ (v. tab. 47.4), a cărui suprafață, reprezentată în figura 47.3, servește, prin urmare, drept suprafață universală a efectului piezoelectric longitudinal în toate cristalele de acest fel. Efectul piezoelectric longitudinal în direcția $\boldsymbol{n}$ se definește, în proiecția stereografică (fig. 47.3), cu ajutorul formulei

$$f(\boldsymbol{n}) = f_{ijk}n_i n_j n_k = 2f_{123}S^0(\boldsymbol{n})/\sqrt{3}. \qquad (58.8)$$

Tot o singură componentă independentă are și tensorul **f** pentru clasa de simetrie piezoelectrică longitudinală $\bar{6}\,m2$, din care

Tabelul 58.2

Legătura dintre tensorul efectului piezoelectric longitudinal, f, şi tensorul coeficienţilor piezoelectrici, pentru toate clasele de simetrie ale cristalelor şi texturilor care permit efectul piezoelectric (poziţia componentelor lui f_{ikl} este aceeaşi ca în tabelul E.10)

Clasele	f_{ikl}			
1	d_{11} $\frac{1}{3}(d_{21}+d_{16})$ $\frac{1}{3}(d_{31}+d_{15})$	$\frac{1}{3}(d_{12}+d_{26})$ d_{22} $\frac{1}{3}(d_{32}+d_{24})$	$\frac{1}{3}(d_{13}+d_{35})$ $\frac{1}{3}(d_{23}+d_{34})$ d_{33}	$\frac{1}{6}(d_{14}+d_{25}+d_{36})$
2 (2 ∥ X_2)	0 $\frac{1}{3}(d_{21}+d_{16})$ 0	0 d_{22} 0	0 $\frac{1}{3}(d_{23}+d_{34})$ 0	$\frac{1}{6}(d_{14}+d_{25}+d_{36})$
2 (2 ∥ X_3)	0 0 $\frac{1}{3}(d_{31}+d_{15})$	0 0 $\frac{1}{3}(d_{32}+d_{24})$	0 0 d_{36}	$\frac{1}{6}(d_{14}+d_{25}+d_{36})$
m ($m \perp X_2$)	d_{11} 0 $\frac{1}{3}(d_{31}+d_{15})$	$\frac{1}{3}(d_{12}+d_{26})$ 0 $\frac{1}{3}(d_{32}+d_{24})$	$\frac{1}{3}(d_{13}+d_{35})$ 0 d_{33}	0
m ($m \perp X_3$)	d_{11} $\frac{1}{3}(d_{21}+d_{16})$ 0	$\frac{1}{3}(d_{12}+d_{26})$ d_{22} 0	$\frac{1}{3}(d_{13}+d_{35})$ $\frac{1}{3}(d_{23}+d_{34})$ 0	0
222	0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{6}(d_{14}+d_{25}+d_{36})$
$mm2$	0 0 $\frac{1}{3}(d_{31}+d_{15})$	0 0 $\frac{1}{3}(d_{32}+d_{24})$	0 0 d_{33}	0
3	d_{11} $-d_{22}$ $\frac{1}{3}(d_{31}+d_{15})$	$-d_{11}$ d_{22} $\frac{1}{3}(d_{31}+d_{15})$	0 0 d_{33}	0
32, $\bar{6}2m$ (2 ∥ X_1)	d_{11} 0 0	$-d_{11}$ 0 0	0 0 0	0
32, $\bar{6}m2$ (2 ∥ X_2, $m \perp X_1$)	0 $-d_{22}$ 0	0 d_{22} 0	0 0 0	0

Clasele	f_{ikl}			
$3m$ $(m \perp X_1)$	0 $-d_{22}$ $\frac{1}{3}(d_{31}+d_{15})$	0 d_{22} $\frac{1}{3}(d_{31}+d_{15})$	0 0 d_{33}	0
$\bar{6}$	d_{11} $-d_{22}$ 0	$-d_{11}$ d_{22} 0	0 0 0	0
$\bar{4}$	0 0 $\frac{1}{3}(d_{31}+d_{15})$	0 0 $-\frac{1}{3}(d_{31}+d_{15})$	0 0 0	$\frac{1}{6}(2d_{14}+d_{36})$
$\bar{4}2m$	0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{6}(2d_{14}+d_{36})$
$4,\ 6,\ \infty,$ $4mm,$ $6mm,\ \infty m$	0 0 $\frac{1}{3}(d_{31}+d_{15})$	0 0 $\frac{1}{3}(d_{31}+d_{15})$	0 0 d_{33}	0
$23,\ \bar{4}3m$	0 0 0	0 0 0	0 0 0	$\frac{1}{2}d_{14}$

Observație. În toate clasele cu centru de simetrie precum și în clasele $\infty\infty$, 432, 622, 422, $\infty 2$ ensorul **f** = 0.
t

fac parte cristalele din clasele $\bar{6}m2$ și 32; el este un multiplu al septorului unitar, $S^{\circ}[\bar{6}m2]$ (v. tab. 47.3) a cărui suprafață (fig. 47.4) este, de asemenea, o suprafață universală a efectului piezo

Tabelul 58.3

Simetria efectului piezoelectric longitudinal

Clasele de simetrie piezoelectrică longitudinală	Cristalele în care efectul piezoelectric prezintă o asemenea simetrie
1	1
m	m
$mm2$	2, $mm2$
$3m$	3, $3m$
$\bar{6}m2$	32, $\bar{6}$, $\bar{6}m2$
∞m	4, 6, ∞, $4mm$, $6mm$, ∞m
$\bar{4}3m$	222, $\bar{4}$, $\bar{4}2m$, 23, $\bar{4}3m$

electric longitudinal, în cristalele din clasele respective. Efectul piezoelectric longitudinal se calculează în acest caz folosind proiecția stereografică din figura 47.4 și formula

$$f(\boldsymbol{n}) = -f_{222}S^0(\boldsymbol{n}). \qquad (58.9)$$

Pentru clasa de simetrie piezoelectrică longitudinală ∞m avem

$$f_{ijl} = F_V V^0_{(i}\delta_{jl)} + F_S S^0_{ijl}, \qquad (58.10)$$

unde tensorii ireductibili unitari ai simetriei ∞m — vectorul $\boldsymbol{V}$ și septorul $\mathbf{S}$ — sînt definiți de formulele (de comparat cu tabelul 47.4 și formulele (52.10) și (52.11))

$$V^0_i = k_i, \qquad (58.11)$$

$$S^0_{ijl} = \frac{1}{2}(5k_ik_jk_l - 3k_{(i}\delta_{jl)}) \qquad (58.12)$$

($\boldsymbol{k}$ este vectorul unitar al axei X_3), coeficienții tensorilor unitari fiind

$$F_V = \frac{3}{5}(f_{333} + 2f_{113}), \qquad F_S = \frac{2}{5}(f_{333} - 3f_{113}). \qquad (58.13)$$

Suprafețele efectului piezoelectric longitudinal pentru cristalele care intră în această clasă de simetrie piezoelectrică longitudinală sînt suprafețe de rotație

$$f(\boldsymbol{n}) = F_V V^0(\boldsymbol{n}) + F_S S^0(\boldsymbol{n}), \qquad (58.14)$$

unde $V^0(\boldsymbol{n})$ și $S^0(\boldsymbol{n})$ sînt suprafețele vectorului și, respectiv, septorului unitari, ale căror secțiuni sînt date în figura 47.1. În funcție de raportul dintre coeficienții F_V și F_S, ele pot avea caracter de septor sau caracter de vector; din primul tip face parte suprafața efectului piezoelectric longitudinal în sulfura de cadmiu, CdS (clasa $6mm$); din cel de al doilea tip face parte titanatul de bariu, $BaTiO_3$ (clasa $4mm$), figura 58.1. Ambele cristale sînt larg utilizate în tehnică.

Dacă suprafața efectului piezoelectric longitudinal nu este o suprafață de rotație, este mai comod ca ea să fie reprezentată cu ajutorul proiecțiilor stereografice (v. § 24). Astfel, în figura 44.2

sînt reprezentate cele două proiecții stereografice și secțiunea suprafeței efectului piezoelectric longitudinal al unui cristal de turmalină (clasa $3m$). Proiecțiile stereografice ale suprafețelor efectului piezoelectric longitudinal în două dintre cristalele sistemului monoclinic sînt reprezentate în figurile 58.2 și 58.3. Este

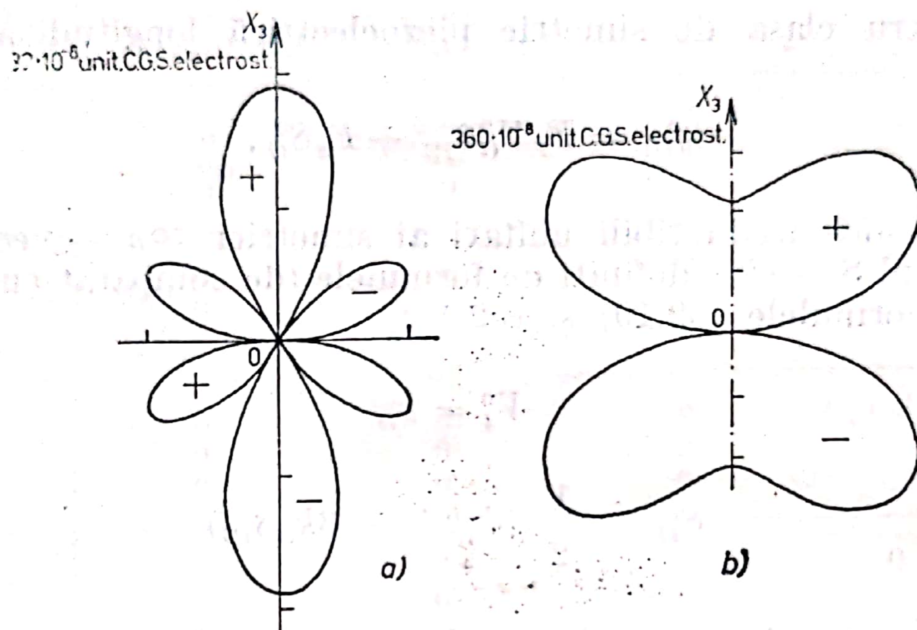


Fig. 58.1. Secțiuni ale suprafețelor efectului piezoelectric longitudinal, reprezentînd suprafețe de rotație : *a*) pentru un cristal de sulfură de cadmiu, CdS, clasa $6mm$; *b*) pentru un cristal de titanat de bariu, $BaTiO_3$, clasa $4mm$. Simetria suprafețelor este ∞m, iar antisimetria $\infty/m'm$ (v. § 68) (Butabaev și Sirotin, 1972).

remarcabil caracterul complet diferit al anizotropiei acestor cristale, care aparțin aceleiași clase, anume clasa 2. Simetria efectului piezoelectric longitudinal în aceste cristale este $mm2$; planurile de simetrie care trec prin axa 2 pot fi determinate din figurile 58.2 și 58.3, dar ele ar apărea mult mai intuitiv dacă axa 2 ar fi scoasă prin centrul proiecției.

Coeficienții piezoelectrici ai unor cristale sînt cuprinși în tabelul 58.4 (cu privire la coeficientul piezoelectric $e_{k\lambda}$, v. § 61).

Studiind influența simetriei cristalelor asupra proprietăților piezoelectrice, am folosit formele generale ale tensorului coeficienților piezoelectrici, **d**, calculate pentru diferite clase cristalografice. Unele dintre rezultatele acestui studiu se pot obține fără nici un calcul, plecînd numai de la principiul Curie și teorema lui Hermann. Tocmai de acest lucru ne vom ocupa aici.

Pentru ca într-un cristal (și în general într-un mediu omogen oarecare) să poată apărea o polarizare electrică sub influența unor anumite condiții exterioare este necesar ca în cristalul supus acestor acțiuni să existe cel puțin o direcție polară specială, pentru aceasta fiind necesar, la rîndul său (v. §§ 3, 25 și anexa C), ca grupul de simetrie al mediului supus acțiunii exterioare să fie ∞m, sau orice grup al său

$$\infty m \supseteq G_{\text{med. act}} \qquad (58.15)$$

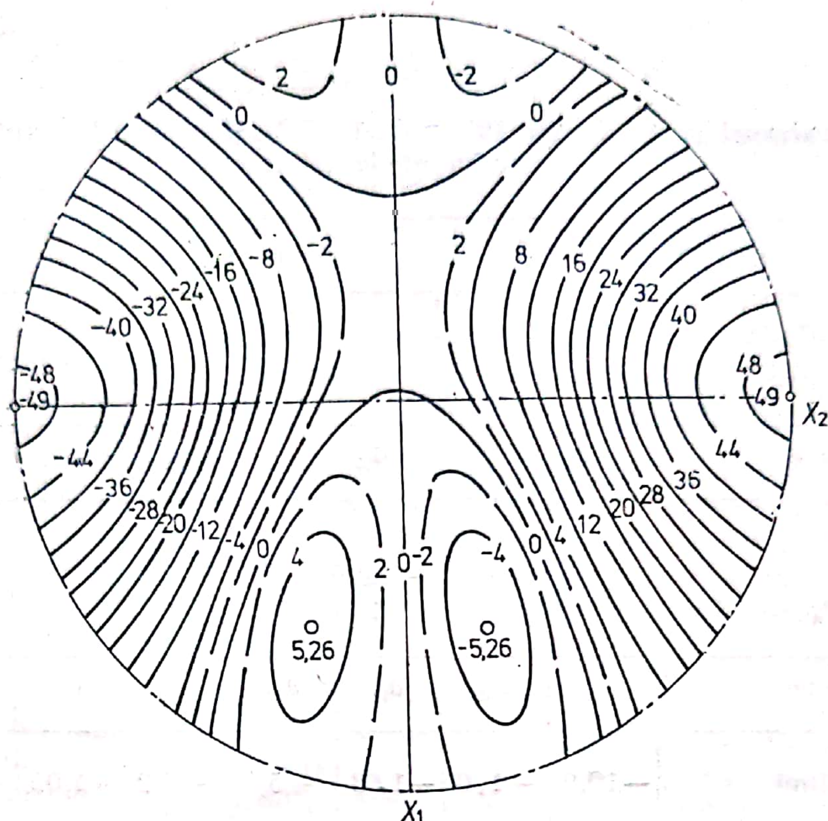


Fig. 58.2. Proiecția stereografică a suprafeței efectului piezoelectric longitudinal în sulfatul de litiu, $Li_2SO_4 \cdot H_2O$, clasa 2. Simetria suprafeței este *mm*2, antisimetria *mmm'*. În 10^{-8} unități CGSel.

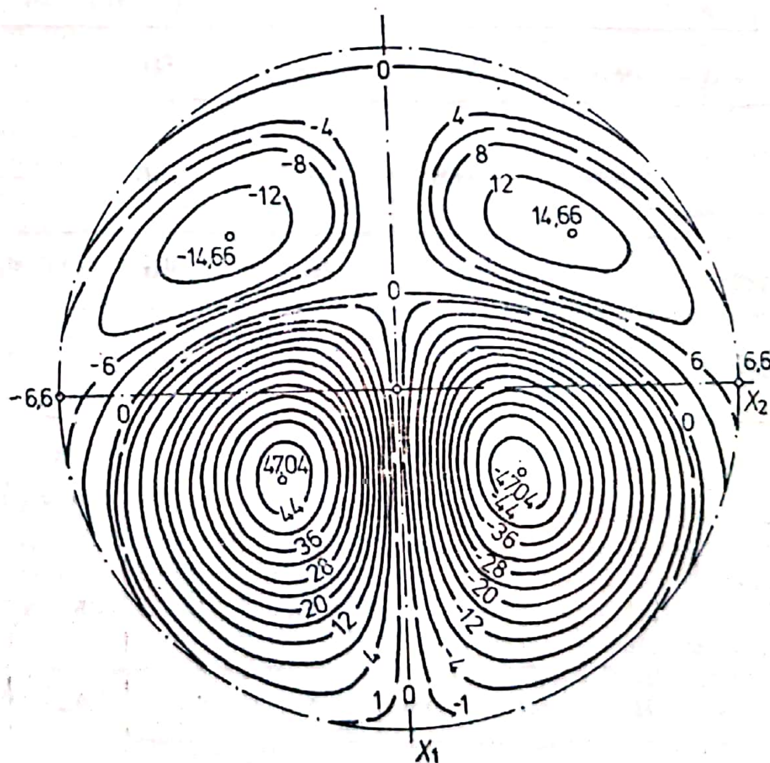


Fig. 58.3. Proiecția stereografică a efectului piezoelectric longitudinal într-un cristal de etilendiamintartrat, clasa 2. Simetria suprafeței este *mm*2, iar antisimetria *mmm'*. În 10^{-8} unități CGSel.

Tabelul 58.4

Coeficienții piezoelectrici, $d_{k\lambda}$ (în 10^{-8} unit. CGSel), și $e_{k\lambda}$ (în 10^{4} unit. CGSel), pentru unele cristale

Clasa $\bar{4}3m$	d_{14}	e_{14}
GaAs	7,80	6,3
ZnS	−9,80	−4,41

Clasele $4mm$, $6mm$, 6	d_{14}	d_{15}	d_{31}	d_{33}
$BaTiO_2$		1176	−103,5	256,8
CdS		−42,9	−11,01	32,01
$LiKSO_4$	5,4	2,7	−7,1	15,6

Clasa $3m$	d_{15}	d_{22}	d_{31}	d_{33}	e_{15}	e_{22}	e_{31}	e_{33}
Turmalină	−10,9	−1,0	−1,03	−5,5	−7,2	−1,05	−3,9	−9,3

Clasa 32	d_{11}	d_{14}	e_{11}	e_{14}
Cuarț α	6,93	−2,18	5,13	−1,22

Clasa 222	d_{14}	d_{25}	d_{36}	e_{14}	e_{25}	e_{36}
Sare Seignette	7000	−169	35,5	140	−4,7	3,4

Clasa $mm2$	d_{15}	d_{24}	d_{31}	d_{32}	d_{33}
Rezorcină	53,9	55,3	−12,4	−12,8	16,8

Clasa 2	d_{14}	d_{16}	d_{21}	d_{22}	d_{23}	d_{25}	d_{34}	d_{36}
$Li_2SO_4 \cdot H_2O$	2,3	−6,0	−10,8	49	5,1	−15,0	−6,4	−12,6
Sulfat triglicinic	8,3	−13,7	70,7	23,8	76,0	73,0	−9,6	8,5
Etilendiamintartrat	−30,1	−36,6	30,3	6,6	−34,0	−53,8	−50,9	−55,1

Clasa 2	e_{14}	e_{16}	e_{21}	e_{22}	e_{23}	e_{25}	e_{34}	e_{36}
$Li_2SO_4 \cdot H_2O$	−1,58	−2,51	7,15	24,4	5,14	−0,45	−0,45	0,93
Etilendiamintartrat	−1,53	−1,88	3,83	2,61	−3,05	−4,79	−2,60	−2,83

însă grupul de simetrie al mediului supus acțiunii, conform principiului Curie, nu trebuie să fie inferior intersecției (partea comună) celor două grupuri: grupul de simetrie al mediului liber, G_{med}, și grupul de simetrie al acțiunii, $G_{acț}$,

$$G_{med,\,acț} \supseteq G_{med} \cap G_{acț}. \qquad (58.16)$$

Comparînd relațiile (58.15) și (58.16), obținem, în final,

$$\infty m \supseteq G_{med} \cap G_{acț}, \qquad (58.17)$$

adică, pentru ca într-un mediu omogen, sub acțiunea unei anumite acțiuni exterioare, să poată apărea o polarizare electrică este necesar ca intersecția grupului de simetrie al mediului cu grupul de simetrie al acțiunii să fie grupul ∞m sau unul dintre subgrupurile sale.

Această regulă generală este valabilă pentru toate formele de polarizare electrică. În cazul polarizării piezoelectrice simetria acțiunii din relația (58.17) este dată de unul dintre cele trei grupuri: $\infty\infty m$, pentru o comprimare după toate direcțiile, ∞/mm, pentru întinderea într-o singură direcție, mmm pentru toate celelalte cazuri.

În cazul general, în care $G_{acț} = mmm$, condiția necesară pentru apariția polarizării piezoelectrice capătă forma

$$\infty m \supseteq G_{med} \cap mmm. \qquad (58.18)$$

Deoarece grupul mmm are centru de simetrie, iar grupul ∞m nu are un astfel de centru de simetrie, condiția (58.18) este valabilă numai pentru grupurile lipsite de centru de simetrie, G_{med}: mediile omogene piezoelectrice nu au centru de simetrie.

Satisfac, oare, toate grupurile fără centru de simetrie, G_{med}, condiția (58.18)? Unul dintre ele, și anume $\infty\infty$, nu satisface această condiție în nici un caz. Într-adevăr, $\infty\infty \cap mmm = 222$, iar acest grup nu este nicidecum un subgrup al grupului ∞m. Prin urmare, în mediile de simetrie $\infty\infty$ polarizarea piezoelectrică nu este posibilă.

Cu totul altfel se rezolvă problema posibilității apariției polarizării piezoelectrice și a efectului piezoelectric în cristalele din clasa 432. Se poate ușor găsi o tensionare astfel încît $432 \cap mmm = 1$; este apoi suficient să o aplicăm în așa fel încît nici una dintre axele de simetrie ale tensorului tensiunilor să nu coincidă cu vreo axă de simetrie a cristalului. Însă în ciuda faptului că (58.18) este satisfăcută în acest caz, efectul piezoelectric *liniar* nu este posibil în cristalele din clasa 432. Într-adevăr, acest efect este descris de un tensor de rangul trei. Conform teoremei lui Hermann, axele de simetrie de ordinul patru reprezintă pentru el axe de ordin infinit. De aici rezultă clar că, în ceea ce privește simetria efectului piezoelectric liniar, cristalele din clasa 432 nu se deosebesc de mediile din clasa $\infty\infty$, însă așa cum am văzut chiar acum, în mediile din clasa $\infty\infty$, polarizarea piezoelectrică este interzisă. Totuși, în afară de efectul piezoelectric liniar, este posibil un efect piezoelectric pătratic extrem de slab, în cadrul căruia polarizarea depinde pătratic de componentele tensorului tensiunilor (v. § 74)

$$D_i = 4\pi Q_{ijklm}\sigma_{jk}\sigma_{lm}. \qquad (58.19)$$

Deoarece efectul pătratic este definit printr-un tensor de rangul cinci, pe cînd ordinul axelor de simetrie al cristalelor din clasa 432 nu este mai mare de patru, teorema lui Hermann nu se poate aplica; prin urmare, polarizarea piezoelectrică de acest tip nu este interzisă de principiile de simetrie. Calculul arată că un tensor de material de rangul cinci, **Q**, de simetrie internă $V[[V^2]^2]$, pentru cristalele din clasa 432 poate avea, într-adevăr, componente diferite de zero (v. tab. E 23; forma unor astfel de tensori pentru cristalele tuturor claselor a fost dedusă de Kopțik, 1966).

Analog se poate arăta că polarizarea piezoelectrică longitudinală în mediile cu simetria $\infty 2$ este interzisă de principiul Curie. Utilizînd și teorema lui Hermann, se poate dovedi că efectul piezoelectric longitudinal este interzis în cristalele din clasele 422 și 622.

Așadar, interdicțiile impuse de principiul Curie și condițiile de anulare a tuturor componentelor unui tensor de material nu coincid din punct de vedere al conți-

nutului. Interzicînd polarizarea piezoelectrică în mediile cu simetria ∞∞∞, principiul Curie exclude complet posibilitatea apariției în ele a polarizării electrice ca urmare a acțiunii tensiunilor mecanice, fără a se referi la caracterul dependenței funcționale a polarizării de tensiuni — dacă aceasta este liniară, pătratică sau și mai complicată. Dimpotrivă, din anularea tensorului coeficienților piezoelectrici pentru un mediu cu o simetrie determinată, rezultă doar că în acest mediu nu este posibilă o polarizare piezoelectrică care să depindă liniar de tensiuni; posibilitatea apariției unei polarizări piezoelectrice care să depindă de tensiuni printr-o legătură funcțională mai complicată (de exemplu, pătratică) nu este exclusă.

Avînd în vedere efectele piezoelectric, piezoelectric invers, electrocaloric și piezocaloric, obținem o schemă elegantă a interacțiunilor fenomenelor termic, electric și mecanic, care apar în cristale: orice forță termodinamică generalizată, aplicată unui cristal provoacă, în general, variația tuturor coordonatelor termodinamice generalizate. Această schemă este ilustrată în figura 58.4, luată, cu unele modificări, din lucrarea lui Nye (1967).

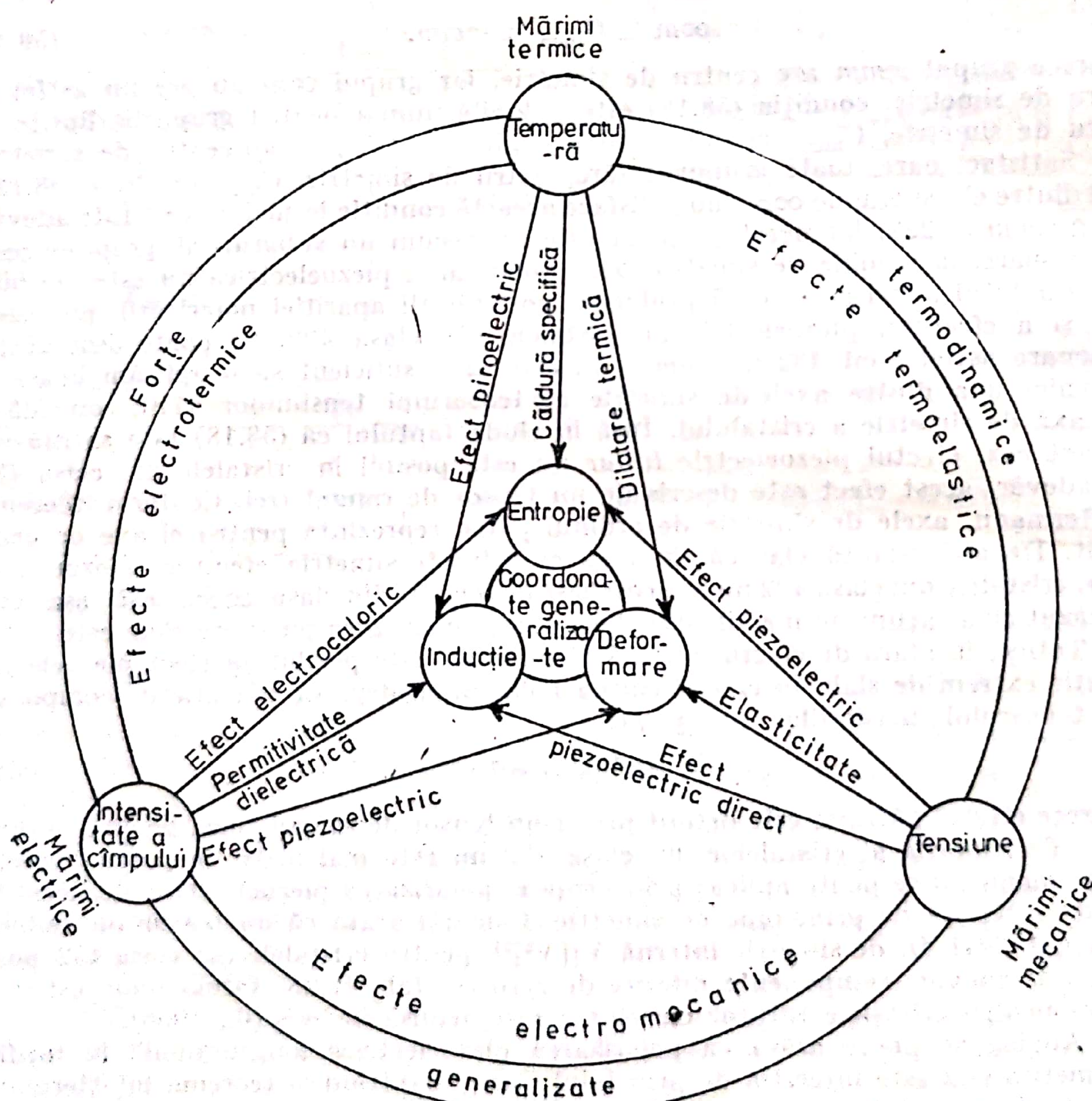


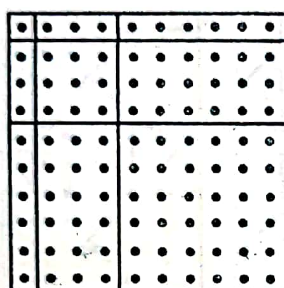
Fig. 58.4. Schema interacțiunilor dintre fenomenele termice, electrice și mecanice în cristale.

Schema interacţiunilor termice, electrice şi mecanice ale proprietăţilor cristalelor se realizează complet numai în absenţa simetriei punctuale, adică în cazul cristalelor din clasa 1. Din nefericire, pînă în prezent nu există nici un cristal din clasa 1 pentru care să se fi reuşit măsurarea tuturor componentelor. Simetria cristalelor duce la dispariţia unora sau altora dintre interacţiuni. Acest fapt este ilustrat intuitiv de matriţele din tabelul 58.5 (Nye, 1967).

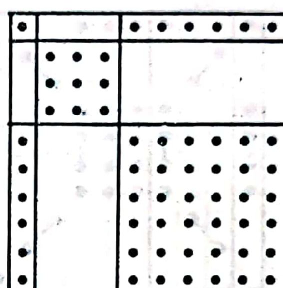
Matricele termodinamice, M, pentru toate clasele cristalografice şi clasele limită

Sistemul triclinic

clasa I

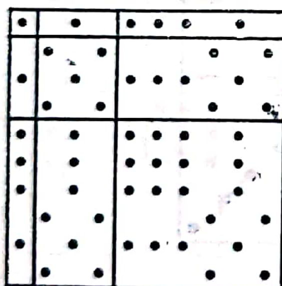


clasa I

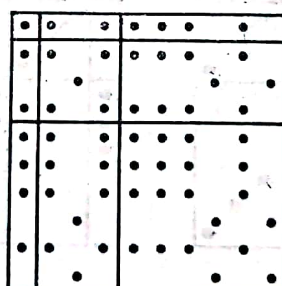


Sistemul monoclinic

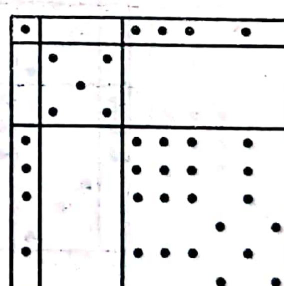
clasa 2



clasa *m*

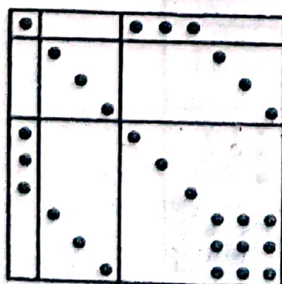


clasa 2/*m*

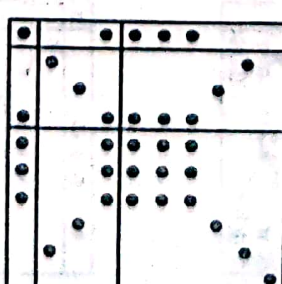


Sistemul rombic

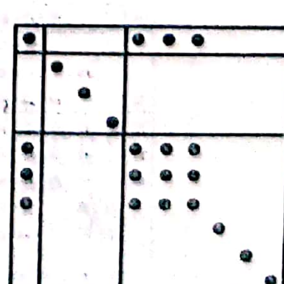
clasa 222



clasa *mm*2

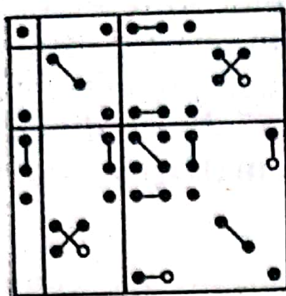


clasa *mmm*

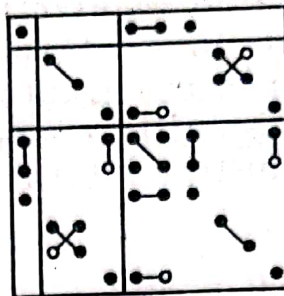


Sistemul tetragonal

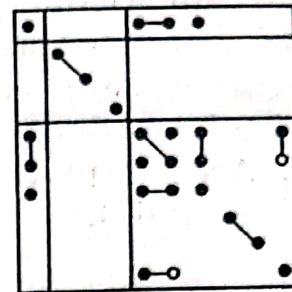
clasa 4



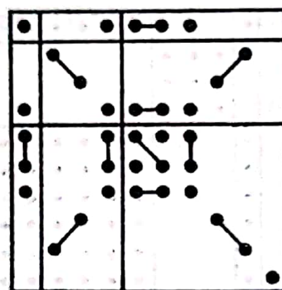
clasa $\bar{4}$



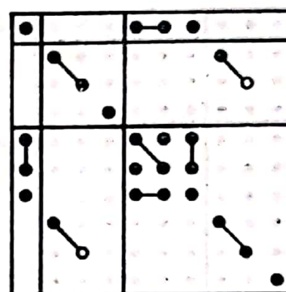
clasa $4/m$



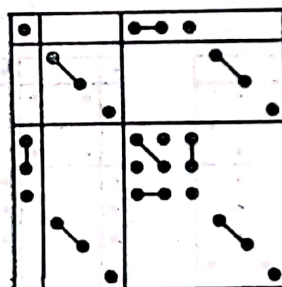
clasa $4mm$



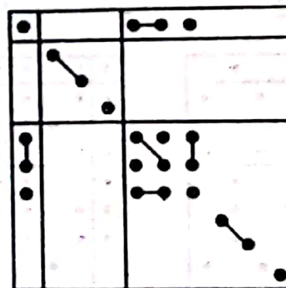
clasa 422



clasa $\bar{4}2m$

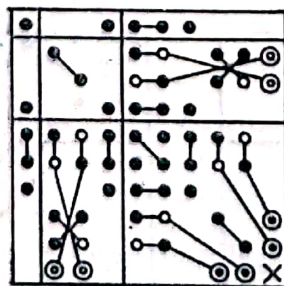


clasa $4/mm$

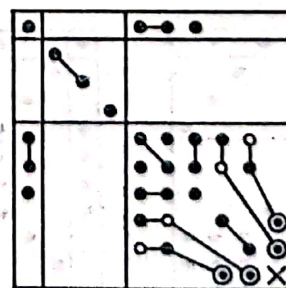


Sistemul trigonal

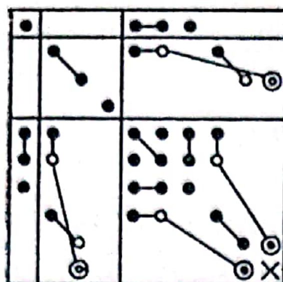
clasa 3



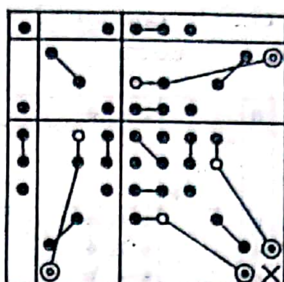
clasa $\bar{3}$



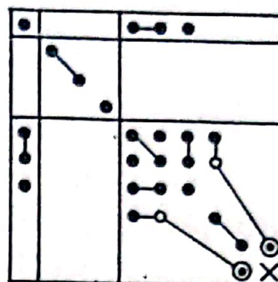
clasa 32



clasa $3m$

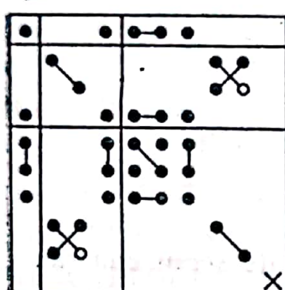


clasa $\bar{3}m$

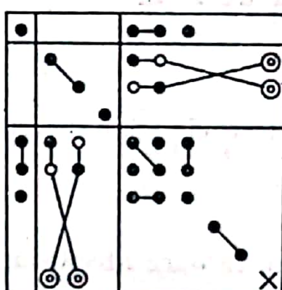


Sistemul hexagonal și texturile

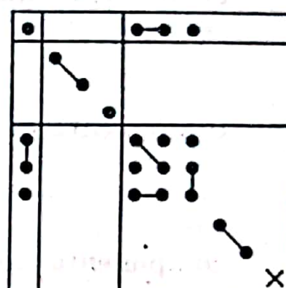
clasele 6 și ∞



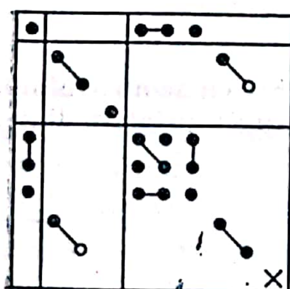
clasa $\bar{6}$



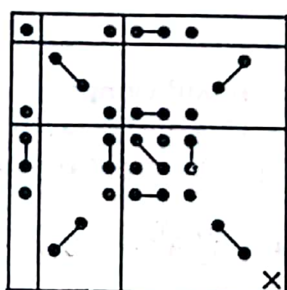
clasele $6/m$, $6/mmm$, ∞/m și ∞/mm



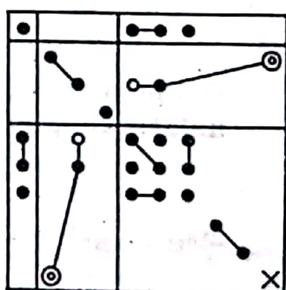
clasele 622 și ∞2



clasele $6mm$ și ∞m

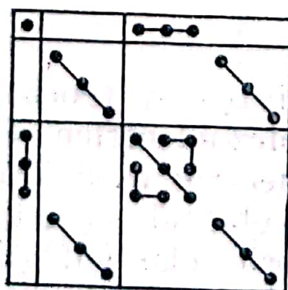


clasa $\bar{6}m2$

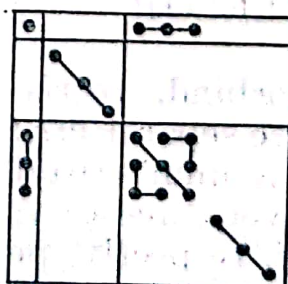


Sistemul cubic

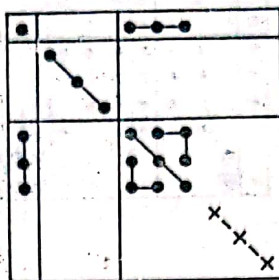
clasele 23 și $\bar{4}3m$



clasele $m3$, 432 și $m3m$



clasele $\infty\infty m$ și $\infty\infty$



N o t a ț i i l e

● componentă diferită de zero,

●—● componente egale între ele (dar diferite de zero),

●—○ componente egale în valoare absolută, dar de semn contrar,

⊙ componentă egală cu dublul componentei notate cu punct (●), cu care acest semn este unit printr-o linie,

⊚ componentă egală cu dublul componentei luate cu semn schimbat, notată cu punct, cu care acest semn este unit printr-o linie,

× $2(s_{11} - s_{12}) = 2(M_{44} - M_{45})$.

Toate matricele sînt simetrice față de diagonala principală.

---

§ 59. REZOLVAREA SIMULTANĂ A ECUAȚIILOR ELECTROSTATICII ȘI ELASTOSTATICII CRISTALELOR

Riguros vorbind, teoria elasticității și teoria electrostaticii nu pot fi aplicate separat cristalelor piezoelectrice. Orice variație a stării electrice a unui cristal piezoelectric modifică și starea lui mecanică, și invers, aceste variații trebuind să satisfacă ecuațiile electrostaticii și, respectiv, pe ale teoriei elasticității. Rezultă deci că pentru determinarea intensității și inducției cîmpului electric,

a tensiunilor și a deformațiilor dintr-un cristal, trebuie rezolvat sistemul de ecuații

$$\operatorname{div} \boldsymbol{D} = 0, \qquad \operatorname{rot} \boldsymbol{E} = 0; \tag{59.1}$$

$$\operatorname{Div} \sigma = 0, \qquad \operatorname{Ink} \varepsilon = 0 \tag{59.2}$$

cu condițiile la limită (electrice și mecanice) corespunzătoare, ținînd cont de legătura dintre tensorii de cîmp

$$\boldsymbol{D} = \varkappa \cdot \boldsymbol{E} + 4\pi \mathrm{d} : \sigma,$$

$$\varepsilon = \boldsymbol{E} \cdot \mathrm{d} + \mathrm{s} : \sigma. \tag{59.3}$$

Tocmai această legătură face imposibilă rezolvarea separată, numai a unuia dintre sistemele (59.1) sau (59.2).

Rezolvarea sistemului complet de ecuații ale echilibrului electric și elastic, în funcții elementare, este posibilă numai în unele cazuri deosebit de simple. Cîteva dintre aceste cazuri, care au valoare practică și care permit, totodată, să ne dăm seama de subtilitățile problemei, vor fi examinate aici.

Lamelă piezoelectrică sub acțiunea unor tensiuni mecanice omogene. Să examinăm o lamelă cristalină, a cărei grosime, a, este mult mai mică decît lungimea și lățimea : $a^2 \ll S$; aceasta permite să neglijăm efectele de la margini. Orientarea lamelei este dată de vectorul unitar al normalei, $\boldsymbol{n}$; vom conveni să-l considerăm orientat dinspre regiunea inferioară a lamelei spre cea superioară. Fețele perpendiculare pe $\boldsymbol{n}$ sînt metalizate. Peliculei i se aplică o tensiune σ. Să determinăm deformarea și densitatea de sarcină pe armături.

Deoarece suprafețele sînt metalizate, ele vor fi suprafețe echipotențiale. Luînd originea coordonatelor undeva pe armătura nferioară, vom introduce coordonata $z = \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{r}$. Este evident că o ate planurile paralele cu armăturile vor fi, de asemenea, suprafețe echipotențiale, potențialul φ depinzînd numai de z, adică $= \varphi(z)$. Atunci intensitatea cîmpului electric este

$$\boldsymbol{E} = -\varphi' \boldsymbol{n},$$

unde

$$\varphi' = \mathrm{d}\varphi/\mathrm{d}z.$$

Asupra armăturilor lamelei acționează eforturile unitare $\sigma \cdot \boldsymbol{n}$ și $-\sigma \cdot \boldsymbol{n}$, iar pe fețele laterale efortul $\sigma \cdot \boldsymbol{q}$, $\boldsymbol{q}$ fiind normala la

porţiunea de suprafaţă laterală considerată. Totodată sînt valabile ecuaţiile echilibrului elastic şi condiţiile la limită pentru tensiuni. Ecuaţiile (59.3) se pot scrie acum în forma

$$\boldsymbol{D} = -\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n}\varphi' + 4\pi\,\mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma}, \tag{59.4}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = -\boldsymbol{n}\cdot\mathbf{d}\varphi' + \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}, \tag{59.5}$$

în care φ' depinde numai de z, $\boldsymbol{\sigma}$ fiind, în general, independent de coordonate. De aceea, ecuaţia div $\boldsymbol{D} = 0$ duce la $\varphi'' = 0$. Rezultă clar de aici că φ este o funcţie liniară de z, ceea ce înseamnă că deformaţiile sînt omogene şi, deci, ecuaţiile de compatibilitate a deformaţiilor, Ink $\boldsymbol{\varepsilon} = 0$ sînt satisfăcute identic.

În cazul în care armăturile sînt scurtcircuitate, $\varphi(0) = \varphi(a)$. Rezultă că $\varphi = \text{const}$, adică intensitatea cîmpului din lamelă este egală cu zero. Densitatea sarcinilor de pe suprafaţă, pe armătura inferioară este egală cu

$$\rho_{\text{supr}} = \frac{1}{4\pi}\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{D} = \boldsymbol{n}\cdot\mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma}. \tag{59.6}$$

Pe armătura superioară ea are aceeaşi mărime, fiind însă de semn contrar (aceasta din cauză că normala la suprafaţă este orientată în sens contrar). În acest caz, deformaţiile din lamelă, conform (59.5) sînt egale cu $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}$, adică sînt aceleaşi ca şi în absenţa efectului piezoelectric.

În cazul unor armături izolate între ele, diferenţa de potenţial

$$U = \varphi(0) - \varphi(a) = -a\varphi'$$

nu mai este egală cu zero şi, deci, şi cîmpul din lamelă va fi diferit de zero. Pe de altă parte, pentru armăturile nescurtcircuitate, $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{D} = 0$. Ţinînd cont de aceasta, din (59.4) obţinem

$$\varphi' = \frac{4\pi\boldsymbol{n}\cdot\mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma}}{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n}} \tag{59.7}$$

de unde deducem atît intensitatea cîmpului, $\boldsymbol{E} = -\varphi\boldsymbol{n}$, cît şi diferenţa de potenţial dintre armături, $U = -a\varphi'$. Deformaţiile nu mai depind acum numai de proprietăţile elastice, ci şi de proprietăţile piezoelectrice ale cristalului : conform relaţiei (59.5)

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{4\pi(\boldsymbol{n}\cdot\mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma})\,\boldsymbol{n}\cdot\mathbf{d}}{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n}} + \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}.$$

Aceasta se poate scrie sub forma

$$\varepsilon = \left[\mathrm{s} - \frac{4\pi(\boldsymbol{n}\cdot\mathrm{d})(\boldsymbol{n}\cdot\mathrm{d})}{\boldsymbol{n}\cdot\varkappa\cdot\boldsymbol{n}} \right] : \sigma. \tag{59.8}$$

Expresia din paranteză joacă rolul unui nou tensor, care va depinde de coeficienţii piezoelectrici — tensorul deformabilităţii elastice. Evident că cu această ocazie rigiditatea lamelei creşte întrucîtva ; acest fapt nici măcar nu este surprinzător : lucrul solicitărilor aplicate feţelor lamelei este cheltuit acum nu numai pentru producerea energiei de deformare elastică

$$W_{\mathrm{elas}} = \frac{1}{2} a\sigma : \varepsilon = \frac{1}{2} a\sigma : \left[\mathrm{s} - \frac{4\pi(\boldsymbol{n}\cdot\mathrm{d})(\boldsymbol{n}\cdot\mathrm{d})}{\boldsymbol{n}\cdot\varkappa\cdot\boldsymbol{n}} \right] : \sigma =$$

$$= \frac{1}{2} a\sigma : \mathrm{s} : \sigma - \frac{1}{2} a \frac{4\pi(\boldsymbol{n}\cdot\mathrm{d} : \sigma)^2}{\boldsymbol{n}\cdot\varkappa\cdot\boldsymbol{n}}$$

pe 1 cm² de lamelă, ci şi pentru producerea energiei electrice (C fiind capacitatea corespunzătoare unui cm² — v. § 28)

$$W_{\mathrm{el}} = \frac{1}{2} C U^2 = \frac{1}{2} \frac{\boldsymbol{n}\cdot\varkappa\cdot\boldsymbol{n}}{4\pi a} \left(\frac{4\pi a \boldsymbol{n}\cdot\mathrm{d} : \sigma}{\boldsymbol{n}\cdot\varkappa\cdot\boldsymbol{n}} \right)^2 = \frac{1}{2} a \frac{4\pi(\boldsymbol{n}\cdot\mathrm{d} : \sigma)}{\boldsymbol{n}\cdot\varkappa\cdot\boldsymbol{n}}$$

pe fiecare centimetru pătrat. Rezultă deci că deformările se reduc exact cu atît, încît micşorarea energiei de elasticitate, determinată prin aceasta, să compenseze apariţia energiei electrice.

Raportul $W_{\mathrm{el}}/(W_{\mathrm{elas}} + W_{\mathrm{el}})$ dă fracţiunea din energia mecanică

$$R_{\mathrm{mec}} = W_{\mathrm{elas}} + W_{\mathrm{el}}$$

consumată prin deformarea lamelei piezoelectrice, care s-a transformat în energie electrică; rădăcina pătrată din acest raport,

$$k = \sqrt{W_{\mathrm{el}}/R_{\mathrm{mec}}} \tag{59.9}$$

se numeşte *coeficientul de cuplaj electromecanic*. El poate fi adus la forma

$$k^2 = \frac{4\pi(\boldsymbol{E}\cdot\mathrm{d} : \sigma)^2}{(\boldsymbol{E}\cdot\varkappa\cdot\boldsymbol{E})(\sigma : \mathrm{s} : \sigma)}. \tag{59.10}$$

Acest raport nu depinde, evident, de mărimea cîmpului electric sau de tensiunile mecanice: dacă se măresc de cîteva ori toate componentele vectorului $\boldsymbol{E}$ sau ale tensorului $\boldsymbol{\sigma}$, el nu se modifică. Datorită însă anizotropiei cristalului, acest raport va depinde substanțial atît de direcția cîmpului electric, cît și de orientarea tensorului tensiunilor.

Practic, starea omogen tensionată a unei lamele piezoelectrice se realizează, de obicei, sub forma unei întinderi sau comprimări într-o singură direcție, care este fie perpendiculară pe peliculă (efect piezoelectric longitudinal), fie se află în planul acesteia (efect piezoelectric transversal).

În cazul efectului longitudinal tensorul tensiunilor este $\boldsymbol{\sigma} = \sigma \boldsymbol{nn}$. Densitatea de suprafață a sarcinii pe armăturile scurtcircuitate este

$$\rho_{supr} = \sigma \boldsymbol{n} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{nn}, \tag{59.11}$$

diferența de potențial dintre armăturile nescurtcircuitate fiind

$$U = 4\pi a\sigma \frac{\boldsymbol{u} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{nn}}{\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\varkappa} \cdot \boldsymbol{n}}. \tag{59.12}$$

Comparînd tensiunea σ cu variația relativă a grosimii peliculei, $\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{n}$, obținem modulul lui Young, $E(\boldsymbol{n})$. În cazul armăturilor scurtcircuitate, mărimea acestuia este aceeași ca și în absența efectului piezoelectric, iar cînd armăturile nu sînt scurtcircuitate (de comparat cu (59.8))

$$\frac{1}{E(\boldsymbol{n})} = \boldsymbol{nn} : \mathbf{s} : \boldsymbol{nn} \left[1 - \frac{4\pi(\boldsymbol{n} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{nn})^2}{(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\varkappa} \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{nn} : \mathbf{s} : \boldsymbol{nn})} \right]. \tag{59.13}$$

Fracția din paranteză reprezintă, evident, pătratul coeficientului de cuplaj electromecanic pentru cazul efectului piezoelectric longitudinal (a se compara cu (59.12)). Deoarece în toate formulele care exprimă efectul longitudinal, tensorul $\mathbf{d}$ intră numai sub forma combinațiilor $\boldsymbol{n} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{nn}$, el poate fi înlocuit prin tensorul efectului piezoelectric longitudinal, $f_{ijk} = f_{(ijk)}$: într-adevăr, pentru orice $\boldsymbol{n}$ avem

$$\boldsymbol{n} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{nn} = \boldsymbol{n} \cdot \mathbf{f} : \boldsymbol{nn}.$$

Simetria tensorului $\mathbf{f}$ a fost studiată amănunțit în § 58.

În cazul efectului transversal, tensorul tensiunilor este $\boldsymbol{\sigma} = \sigma \boldsymbol{qq}$, $\boldsymbol{q}$ fiind tensorul unitar, care se află în planul lamelei. De

data aceasta, densitatea de suprafață a sarcinii pe armăturile scurtcircuitate este

$$\rho_{supr} = \sigma \boldsymbol{n} \cdot \mathrm{d} : \boldsymbol{qq}, \tag{59.14}$$

iar diferența de potențial dintre armăturile nescurtcircuitate este

$$U = 4\pi a \sigma \frac{\boldsymbol{n} \cdot \mathrm{d} : \boldsymbol{nn}}{\boldsymbol{n} \cdot \varkappa \cdot \boldsymbol{n}}. \tag{59.15}$$

Coeficientul de cuplaj electromecanic în cazul efectului transversal

$$k^2 = \frac{4\pi(\boldsymbol{n} \cdot \mathrm{d} : \boldsymbol{qq})}{(\boldsymbol{n} \cdot \varkappa \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{qq} \cdot \mathrm{s} : \boldsymbol{qq})} \tag{59.16}$$

pentru fiecare secțiune dată (adică pentru un $\boldsymbol{n}$ fixat) depinde de direcția de întindere $\boldsymbol{q}$.

Lamelă piezoelectrică căreia i se aplică o diferență de potențial. Să aplicăm armăturilor aceleiași lamele piezoelectrice o diferență de potențial, U. Evident, în peliculă va apărea cîmpul $\boldsymbol{E} = (U/a)\boldsymbol{n}$. Dacă lamela este liberă, adică atît pe armăturile cît și pe fața sa laterală solicitările sînt egale cu zero, atunci tensiunile vor fi egale cu zero în întreaga lamelă. În acest caz,

$$\boldsymbol{D} = (U/a)\varkappa \cdot \boldsymbol{n}, \tag{59.17}$$

$$\varepsilon = (U/a)\boldsymbol{n} \cdot \mathrm{d}. \tag{59.18}$$

De aici deducem densitatea de sarcină pe armătura inferioară

$$\rho_{supr} = \frac{1}{4\pi} \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{D} = \frac{U}{4\pi a} \boldsymbol{n} \cdot \varkappa \cdot \boldsymbol{n}. \tag{59.19}$$

Analoagă, din punct de vedere mecanic, lamelei cu armăturile nescurtcircuitate este o lamelă căreia i se aplică o tensiune de comprimare sau de întindere într-o singură direcție, $\sigma = \sigma \boldsymbol{nn}$, care nu-i permite să-și modifice grosimea, astfel încît tot timpul $\varepsilon : \boldsymbol{nn} = 0$. Din ecuația

$$\varepsilon : \boldsymbol{nn} = (U/a)\, \boldsymbol{n} \cdot \mathrm{d} : \boldsymbol{nn} + \sigma \boldsymbol{nn} : \mathrm{s} : \boldsymbol{nn} = 0,$$

obținem mărimea tensiunii

$$\sigma = -\frac{U}{a}\,\frac{\boldsymbol{n}\cdot \mathrm{d} : \boldsymbol{nn}}{\boldsymbol{nn} : \mathrm{s} : \boldsymbol{nn}}. \tag{59.20}$$

De aici vom obține formula pentru inducție

$$\boldsymbol{D} = \frac{U}{a}\left[\varkappa\cdot\boldsymbol{n} - \frac{4\pi(\boldsymbol{n}\cdot\mathrm{d} : \boldsymbol{nn})\mathrm{d} : \boldsymbol{nn}}{\boldsymbol{nn} : \mathrm{s} : \boldsymbol{nn}}\right],$$

pe care o putem scrie sub forma

$$\boldsymbol{D} = \left[\varkappa - \frac{4\pi(\mathrm{d} : \boldsymbol{nn})(\mathrm{d} : \boldsymbol{nn})}{\boldsymbol{nn} : \mathrm{s} : \boldsymbol{nn}}\right]\cdot\mathbf{E}, \tag{59.21}$$

care este analoagă cu (59.8) : expresia din paranteză are rolul noului tensor, schimbat, al permitivității dielectrice. Densitatea de sarcină de pe armături

$$\rho_{\mathrm{supr}} = \frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{D}}{4\pi} = \frac{U\boldsymbol{n}\cdot\varkappa\cdot\boldsymbol{n}}{4\pi a}\left[1 - \frac{4\pi(\boldsymbol{n}\cdot\mathrm{d} : \boldsymbol{nn})^2}{(\boldsymbol{n}\cdot\varkappa\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{nn} : \mathrm{s} : \boldsymbol{nn})}\right] \tag{59.22}$$

este mai mică decît în cazul lamelei libere, (59.19). Ca și în (59.13), micșorarea ei este dată de pătratul coeficientului raportului electromecanic, k^2. Același coeficient, k^2, arată ce parte anume din energia electrică este cheltuită pentru crearea diferenței de potențial a energiei electrice

$$R_{\mathrm{el}} = \frac{1}{2}CU^2 = \frac{U}{8\pi a}\,\boldsymbol{n}\cdot\varkappa\cdot\boldsymbol{n}$$

trece în energie a tensiunilor mecanice,

$$W_{\mathrm{mec}} = \frac{1}{2}a\sigma : \mathrm{s} : \sigma$$

(ambele mărimi se referă la 1 cm² al lamelei). Într-adevăr,

$$k^2 = \frac{W_{\mathrm{mec}}}{R_{\mathrm{el}}} = \frac{4\pi(\boldsymbol{n}\cdot\mathrm{d} : \boldsymbol{nn})^2}{(\boldsymbol{n}\cdot\varkappa\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{nn} : \mathrm{s} : \boldsymbol{nn})}. \tag{59.23}$$

Cristal piezoelectric sub acțiunea presiunii hidrostatice. Rezolvarea exactă a acestei probleme este posibilă numai pentru un cristal de formă sferică. Fie o sferă piezoelectrică de rază R, avînd tensorul permitivității dielectrice, $\boldsymbol{\varkappa}$, și cel al coeficienților piezoelectrici, $\mathbf{d}$, cufundată într-un lichid izolator cu permitivitatea dielectrică $\varkappa_0$, presiunea lichidului fiind egală cu p. Atît ecuațiile echilibrului elastic, cît și condițiile la limită pentru tensiuni sînt satisfăcute dacă atît în lichid, cît și în cristal tensorul tensiunilor este

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I}. \qquad (59.24)$$

În cadrul problemei enunțate, proprietățile piezoelectrice ale materialului sînt determinate de vectorul $\boldsymbol{d} = \mathbf{d} : \mathbf{I}$, avînd componentele d_{ikk} (v. § 58). Tocmai cu acesta este coliniar vectorul momentului dipolar piezoelectric

$$\boldsymbol{M} = \mathbf{d} : \boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{d} : \mathbf{I} = -p\boldsymbol{d}, \qquad (59.25)$$

care, așa cum ne putem aștepta, prin analogie cu problema sferei piroelectrice (§ 31), determină potențialele cîmpului electric

$$\varphi^{(i)} = -\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{M}, \quad \varphi^{(e)} = (R/r)^3\, \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{M}$$

în cristal și, respectiv, în lichid. Tensorii constanți, $\boldsymbol{\beta}$ și $\boldsymbol{\gamma}$, deocamdată necunoscuți, se determină, ca și în §§ 28 și 31, din condițiile la limită de continuitate ale potențialului φ și ale componentei normale a vectorului $\boldsymbol{D}$, pe suprafața de separație dintre cristalul piezoelectric și lichid. Se constată că

$$\boldsymbol{\beta} = -\boldsymbol{\gamma} = -4\pi(\boldsymbol{\varkappa} + 2\varkappa_0\mathbf{I})^{-1}.$$

De aici găsim intensitatea și inducția cîmpului electric din cristal

$$\boldsymbol{E}^{(i)} = -\operatorname{grad} \varphi^{(i)} = 4\pi\, p(\boldsymbol{\varkappa} + 2\varkappa_0\mathbf{I})^{-1}\cdot\boldsymbol{d}, \qquad (59.26)$$

$$\boldsymbol{D}^{(i)} = \boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{E}^{(i)} + 4\pi\boldsymbol{M} = -2\varkappa_0\boldsymbol{E}^{(i)} \qquad (59.27)$$

(la deducerea expresiei (59.27) pentru inducție se utilizează același procedeu ca și în deducerea formulei (27.28)). Cunoscînd pe $\boldsymbol{E}$ și pe $\boldsymbol{\sigma}$, este ușor să determinăm deformațiile. Vom calcula, în particular, variația relativă a volumului cristalului

$$\frac{\Delta V}{V} = \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{I} = -\frac{p}{K}\,[1 - 4\pi K\boldsymbol{d}\cdot(\boldsymbol{\varkappa} + 2\varkappa_0\mathbf{I})^{-1}\cdot\boldsymbol{d}], \qquad (59.28)$$

unde $K = (\mathbf{I} : \mathbf{s} : \mathbf{I})^{-1}$ este modulul comprimării globale, în volum (v. § 53). Şi în acest caz rigiditatea cristalului creşte ca urmare a efectului piezoelectric. Rolul pătratului coeficientului cuplajului electromecanic, care caracterizează această mărime, îl are aici scăzătorul din paranteza pătrată a formulei (59.28).

§ 60. POTENŢIALE TERMODINAMICE INVARIANTE ŞI NEINVARIANTE ŞI MATRICELE LOR

Energia internă, U, a unui cristal şi potenţialul termodinamic, Φ, sînt funcţii de trei mărimi: un scalar, care caracterizează starea termică a cristalului, un vector, care caracterizează starea lui electrică, şi un tensor simetric de rangul doi, care caracterizează starea lui mecanică. Pe de altă parte, în termodinamică intervin cîte două mărimi de fiecare dintre aceste tipuri: scalarii S şi T, vectorii $\widetilde{\boldsymbol{D}}$ şi $\boldsymbol{E}$ şi tensorii $\boldsymbol{\varepsilon}$ şi $\boldsymbol{\sigma}$. Energia internă, U, are rolul de potenţial termodinamic al cristalului în raport cu setul S, $\widetilde{\boldsymbol{D}}$, $\boldsymbol{\varepsilon}$, iar potenţialul termodinamic Φ, în raport cu setul T, $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{\sigma}$. În total există $2^3 = 8$ seturi de acestea şi, respectiv, 8 potenţiale termodinamice invariante. Toate acestea se obţin din energia internă scăzînd din ea unul, două sau trei dintre produsele

$$TS, \quad \boldsymbol{E}\cdot\widetilde{\boldsymbol{D}}, \quad \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}. \tag{60.1}$$

Invarianţa lor faţă de grupul punctual G de simetrie al cristalului rezultă din faptul că energia internă, $U = U(S, \widetilde{\boldsymbol{D}}, \boldsymbol{\varepsilon})$ este invariantă faţă de grupul G, iar fiecare dintre produsele (60.1) este invariant faţă de grupul $\infty\infty m \supset G$.

Să luăm, de exemplu, potenţialul $H_{el} = U - \boldsymbol{E}\cdot\widetilde{\boldsymbol{D}}$, denumit *entalpie electrică*. Diferenţiala lui totală este

$$\mathrm{d}H_{el} = \mathrm{d}U - \boldsymbol{E}\cdot\mathrm{d}\widetilde{\boldsymbol{D}} - \widetilde{\boldsymbol{D}}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{E} = T\mathrm{d}S - \widetilde{\boldsymbol{D}}.\mathrm{d}\boldsymbol{E} + \boldsymbol{\sigma} : \mathrm{d}\boldsymbol{\varepsilon}, \tag{60.2}$$

de unde se vede clar că el este un potenţial termodinamic în raport cu setul S, $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{\varepsilon}$. Şi într-adevăr, din (60.2) rezultă că

$$T = \frac{\partial H_{el}}{\partial S}, \quad \widetilde{\boldsymbol{D}} = -\frac{\partial H_{el}}{\partial \boldsymbol{E}}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial H_{el}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}. \tag{60.3}$$

Celelalte potenţiale se obţin în mod analog. Toate aceste potenţiale sînt cuprinse în tabelul 60.1. Trebuie să atragem atenţia că nici

Cele opt potențiale termodinamice invariante

Notația și definiția	Denumirea	Diferențiala totală
U	energia internă	$\mathrm{d}U = T\mathrm{d}S + \boldsymbol{E}\cdot\mathrm{d}\widetilde{\boldsymbol{D}} + \boldsymbol{\sigma} : \mathrm{d}\boldsymbol{\varepsilon}$
$F = U - TS$	energia liberă	$\mathrm{d}F = -S\mathrm{d}T + \boldsymbol{E}\cdot\mathrm{d}\widetilde{\boldsymbol{D}} + \boldsymbol{\sigma} : \mathrm{d}\boldsymbol{\varepsilon}$
$H_{el} = U - \boldsymbol{E}\cdot\widetilde{\boldsymbol{D}}$	entalpia electrică	$\mathrm{d}H_{el} = T\mathrm{d}S - \widetilde{\boldsymbol{D}}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{E} + \boldsymbol{\sigma} : \mathrm{d}\boldsymbol{\varepsilon}$
$H_{mec} = U - \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}$	entalpia mecanică	$\mathrm{d}H_{mec} = T\mathrm{d}S + \boldsymbol{E}\cdot\mathrm{d}\widetilde{\boldsymbol{D}} - \boldsymbol{\varepsilon} : \mathrm{d}\boldsymbol{\sigma}$
$H = U - \boldsymbol{E}\cdot\widetilde{\boldsymbol{D}} - \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}$	entalpia	$\mathrm{d}H = T\mathrm{d}S + \widetilde{\boldsymbol{D}}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{E} - \boldsymbol{\varepsilon} : \mathrm{d}\boldsymbol{\sigma}$
$\Phi_{mec} = U - TS - \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}$	potențialul termodinamic	$\mathrm{d}\Phi_{mec} = -S\mathrm{d}T + \boldsymbol{E}\cdot\mathrm{d}\widetilde{\boldsymbol{D}} - \boldsymbol{\varepsilon} : \mathrm{d}\boldsymbol{\sigma}$
$\Phi_{el} = U - TS - \boldsymbol{E}\cdot\widetilde{\boldsymbol{D}}$	potențialul termodinamic electric	$\mathrm{d}\Phi_{el} = -S\mathrm{d}T - \widetilde{\boldsymbol{D}}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{E} + \boldsymbol{\sigma} : \mathrm{d}\boldsymbol{\varepsilon}$
$\Phi = U - TS - \boldsymbol{E}\cdot\widetilde{\boldsymbol{D}} - \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}$	potențialul termodinamic	$\mathrm{d}\Phi = -S\mathrm{d}T - \widetilde{\boldsymbol{D}}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{E} - \boldsymbol{\varepsilon} : \mathrm{d}\boldsymbol{\sigma}$

denumirile și cu atît mai mult notațiile folosite în tabel nu sînt universal acceptate (în particular, potențialul termodinamic Φ este denumit uneori energie liberă Gibbs, iar energia liberă F, energie liberă Helmholtz).

Aceleași opt potențiale sînt reprezentate în figura 60.1, care ilustrează procedeul de obținere a acestor potențiale și a legăturii dintre ele. Potențialele sînt plasate în vîrfurile unui romboedru. Vîrful cel mai de sus este ocupat de energia internă — potențial în raport cu coordonatele termodinamice generalizate. Mai jos sînt plasate trei vîrfuri, ocupate de potențialele în raport cu două coordonate și o forță. Și mai jos sînt alte trei vîrfuri în raport cu două forțe și o singură coordonată. În fine, vîrful cel mai de jos este ocupat de potențialul termodinamic Φ, funcție de forțele termodinamice generalizate. Și muchiilor li se poate atribui o semnificație fizică bine determinată: coborîrea pe muchia din față înseamnă scaderea produsului TS, coborîrea spre dreapta și în spate — scăderea produsului scalar $\boldsymbol{E}\cdot\widetilde{\boldsymbol{D}}$, coborîrea spre stînga și în spate — scăderea produsului biscalar $\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}$. Deplasarea în sens invers înseamnă, bineînțeles, adăugarea produselor respective. Vîrfurile opuse ale romboedrului sînt ocupate de potențiale în raport cu variabilele termodinamice ale seturilor complementare, de pildă, $U(S, \widetilde{\boldsymbol{D}}, \boldsymbol{\varepsilon})$ și $\Phi(T, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{\sigma})$, sau $F(T, \widetilde{\boldsymbol{D}}, \boldsymbol{\varepsilon})$ și $H(S, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{\sigma})$.

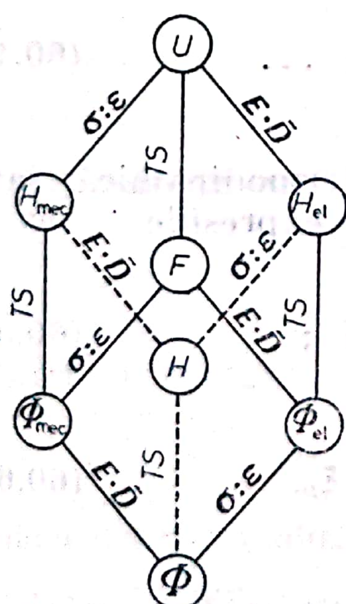


Fig. 60.1. Romboedrul potențialelor termodinamice.

Există și potențiale termodinamice neinvariante. Astfel sînt, de exemplu, funcția $U - E_1\widetilde{D}_1$ — potențialul termodinamic în ra-

port cu S, E_1, $\widetilde{D}_2$, $\widetilde{D}_3$, ε_1, ε_2, ε_3, ε_4, ε_5, ε_6 — și funcția $U - TS - E_1\widetilde{D}_1 - \sigma_2\varepsilon_2$ — potențialul termodinamic în raport cu setul T, E_1, $\widetilde{D}_2$, $\widetilde{D}_3$, ε_1, σ_2, ε_3, ε_4, ε_5, ε_6.

Aceste potențiale depind mai mult sau mai puțin de direcție. De exemplu, potențialul $U - E_1\widetilde{D}_1$ depinde de alegerea versorului $\boldsymbol{e}_1$: dacă el se ia altfel, acest potențial, de regulă, se schimbă. Totuși, potențialul $U - E_1\widetilde{D}_1$ nu depinde de modul în care sînt aleși versorii $\boldsymbol{e}_1$ și $\boldsymbol{e}_2$ în planul perpendicular pe acest versor. Potențialul $U - TS - E_1\widetilde{D}_1 - \sigma_2\varepsilon_2$ dimpotrivă, depinde de alegerea celor doi versori, $\boldsymbol{e}_1$ și $\boldsymbol{e}_2$, adică de sistemul de coordonate în întregime.

Potențialele neinvariante pot fi considerate funcții nu numai de argumentele termodinamice obișnuite, ci și de unul sau de cîțiva vectori unitari, $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{q}$,... Astfel, potențialul $U - E_1\widetilde{D}_1$ reprezintă o valoare particulară (pentru $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{e}_1$) a potențialului $U - (\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{p})(\widetilde{\boldsymbol{D}}\cdot\boldsymbol{p})$, iar potențialul $U - TS - E_1\widetilde{D}_1 - \sigma_2\varepsilon_2$, o valoare particulară (pentru $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{e}_2$) a potențialului $U - TS - (\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{p})(\widetilde{\boldsymbol{D}}\cdot\boldsymbol{p}) - (\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{qq})(\boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{qq})$.

Fie Ψ un potențial termodinamic oarecare (nu în mod obligatoriu invariant), ar $\xi_1, \ldots, \xi_{10}$ argumentele sale (y_A sau Y_A), măsurate de la starea inițială, pentru care toate forțele termodinamice Y_A sînt egale cu zero, cristalul nefiind deformat și nici polarizat. Atunci, primii termeni ai dezvoltării sale în serie Taylor sînt de forma

$$\Psi = \Psi_0 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial\xi_A\partial\xi_B}\right)_0 \xi_A\xi_B + \ldots \tag{60.4}$$

După cum argumentul ξ_A este coordonată termodinamică sau forță termodinamică, este valabilă una dintre expresiile

$$\xi_A = y_A, \quad Y_A = \left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial\xi_A\partial\xi_B}\right)\xi_B; \tag{60.5}$$

$$\xi_A = Y_A, \quad y_A = -\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial\xi_A\partial\xi_B}\right)\xi_B. \tag{60.6}$$

Vom numi matricea potențialului Ψ matricea $\|(\partial^2\Psi/\partial\xi_A\partial\xi_B)_0\|$, dacă Ψ este invariant, fiind plasat în jumătatea superioară a romboedrului din figura 60.1, sau dacă Ψ este neinvariant, fiind obținut prin scăderea din U a nu mai mult de cinci produse $Y_{(A)}y_{(A)}$.

În toate celelalte cazuri, vom considera matrice a potențialului matricea $\|-(\partial^2\Psi/\partial\xi_A\partial\xi_B)_0\|$.

Vom menționa cîteva proprietăți ale unor astfel de matrice termodinamice. Toate sînt simetrice. Oricare dintre ele poate fi folosită pentru determinarea aproximativă a potențialului corespunzător, cu ajutorul formulei (60.4), a forței termodinamice (60.5) sau a coordonatei termodinamice (60.6). În sfîrșit, matricele potențialelor Ψ și Ω în raport cu seturile de argumente reciproc complementare $\xi_1, \ldots, \xi_{10}$ și $\zeta_1, \ldots, \zeta_{10}$ satisfac relații de forma

$$\left\|\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial\xi_A\partial\xi_D}\right)_0\right\|^{-1} = \|E_{AB}\| \left\| - \left(\frac{\partial^2\Omega}{\partial\zeta_B\partial\zeta_C}\right)_0\right\| \|E_{CD}\|, \qquad (60.7)$$

$\|E_{AB}\|$ fiind o matrice diagonală, în diagonalele căreia se află plus și minus unu

$$E_{AB} = \begin{cases} +\delta_{AB}, \text{ dacă } \xi_A = y_A,\ \zeta_A = Y_A; \\ -\delta_{AB}, \text{ dacă } \xi_A = Y_A,\ \zeta_A = y_A. \end{cases}$$

Astfel, matricea potențialului termodinamic

$$\|M_{AB}\| = \|-(\partial^2\Phi/\partial Y_A\ \partial Y_B)_0\|$$

introdusă în § 57, determină în primă aproximație potențialul termodinamic

$$\Phi = \Phi_0 - \frac{1}{2} M_{AB} Y_A Y_B \qquad (60.8)$$

și dependența coordonatelor termodinamice de forțele termodinamice

$$y_A = M_{AB} Y_B. \qquad (60.9)$$

Matricea energiei interne,

$$\|N_{AB}\| = \|(\partial^2 U/\partial y_A\ \partial y_B)_0\|$$

joacă un rol analog

$$U = U_0 + \frac{1}{2} N_{AB} y_A y_B, \qquad (60.10)$$

$$Y_A = N_{AB} y_B; \qquad (60.11)$$

evident că ea este inversa matricei potenţialului termodnamic: $N = M^{-1}$; în acest caz (şi numai în acesta) E este pur şi simplu matricea unitate.

Într-o scriere mai detaliată, formula (60.11) capătă forma

$$\Theta = (T_0/C_v)\,\Sigma - (T_0/C_v)\,q_k\widetilde{D}_k - (T_0/C_v)\,\beta_\mu\varepsilon_\mu, \qquad (60.12,\ a)$$

$$E_i = -(T_0/C_v)\,q_i\Sigma + 4\pi\eta_{ik}\widetilde{D}_k - h_{i\mu}\varepsilon_\mu, \qquad (60.12,\ b)$$

$$\sigma_\lambda = -(T_0/C_v)\,\beta_\lambda\Sigma - h_{k\lambda}\widetilde{D}_k + c_{\lambda\mu}\varepsilon_\mu \qquad (60.12,\ c)$$

(literele a, b, c din numerotarea formulelor se referă, respectiv, la mărimile termice, electrice şi mecanice). În aceste formule C_v este căldura specifică raportată la unitatea de volum pentru deformări constante şi inducţie constantă, η_{ik} este impermitivitatea dielectrică adiabatică pentru deformaţii constante, $c_{\lambda\mu}$ sînt coeficienţii adiabatici ai elasticităţii în cazul inducţiei constante, β_λ sînt coeficienţii de termoelasticitate pentru cazul inducţiei constante, q_i şi $h_{i\mu}$ sînt vectorul şi, respectiv, tensorul, care descriu proprietăţile piroelectrice şi piezoelectrice ale unui cristal şi care nu au nici o denumire general acceptată (denumirea de „constanta lui Mason" pentru $h_{i\mu}$ nu a căpătat, după cît se pare, o răspîndire prea largă).

Drept un al doilea exemplu să examinăm potenţialul $H_{el}(S, \boldsymbol{E}, \varepsilon)$. Din relaţia (60.3) obţinem

$$\Theta = \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial S^2}\right)_0 \Sigma + \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial S\,\partial \boldsymbol{E}}\right)_0 \cdot \boldsymbol{E} + \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial S\,\partial \varepsilon}\right)_0 : \varepsilon, \qquad (60.13,a)$$

$$\widetilde{\boldsymbol{D}} = -\left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial \boldsymbol{E}\,\partial S}\right)_0 \Sigma - \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial \boldsymbol{E}\,\partial \boldsymbol{E}}\right)_0 \cdot \boldsymbol{E} - \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial \boldsymbol{E}\,\partial \varepsilon}\right)_0 : \varepsilon, \qquad (60.13,\ b)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial \varepsilon\,\partial S}\right)_0 \Sigma + \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial \varepsilon\,\partial \boldsymbol{E}}\right)_0 \cdot \boldsymbol{E} + \left(\frac{\partial^2 H_{el}}{\partial \varepsilon\,\partial \varepsilon}\right)_0 : \varepsilon, \qquad (60.13,\ c)$$

sau, în formă matriceală,

$$\left\|\begin{matrix} \Theta \\ -\widetilde{\boldsymbol{D}} \\ \boldsymbol{\sigma} \end{matrix}\right\| = \left\|\begin{matrix} (\partial^2 H_{el}/\partial S^2)_0 & (\partial^2 H_{el}/\partial S\,\partial \boldsymbol{E})_0 & (\partial^2 H_{el}/\partial S\,\partial \varepsilon)_0 \\ (\partial^2 H_{el}/\partial \boldsymbol{E}\partial S)_0 & (\partial^2 H_{el}/\partial \boldsymbol{E}\partial \boldsymbol{E})_0 & (\partial^2 H_{el}/\partial \boldsymbol{E}\partial \varepsilon)_0 \\ (\partial^2 H_{el}/\partial \varepsilon\,\partial S)_0 & (\partial^2 H_{el}/\partial \varepsilon\,\partial \boldsymbol{E})_0 & (\partial^2 H_{el}/\partial \varepsilon\,\partial \varepsilon)_0 \end{matrix}\right\| \left\|\begin{matrix} \Sigma \\ \cdot E \\ :\varepsilon \end{matrix}\right\|. \qquad (60.13)$$

Potențialul în raport cu setul complementar de argumente este $\Phi_{mec}(T, \widetilde{\boldsymbol{D}}, \boldsymbol{\sigma})$; pentru matricea sa ecuația, analoagă relației (60.13) este de forma

$$\left\| \begin{matrix} \Sigma \\ -\boldsymbol{E} \\ \boldsymbol{\varepsilon} \end{matrix} \right\| =$$

$$= \left\| \begin{matrix} -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial T^2)_0 & -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial T\partial\widetilde{\boldsymbol{D}})_0 & -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial T\partial\boldsymbol{\sigma})_0 \\ -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial\widetilde{\boldsymbol{D}}\partial T)_0 & -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial\widetilde{\boldsymbol{D}}\partial\widetilde{\boldsymbol{D}})_0 & -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial\widetilde{\boldsymbol{D}}\partial\boldsymbol{\sigma})_0 \\ -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial\boldsymbol{\sigma}\partial T)_0 & -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial\boldsymbol{\sigma}\partial\widetilde{\boldsymbol{D}})_0 & -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial\boldsymbol{\sigma}\partial\boldsymbol{\sigma})_0 \end{matrix} \right\| \left\| \begin{matrix} \Theta \\ \cdot\widetilde{\boldsymbol{D}} \\ :\boldsymbol{\sigma} \end{matrix} \right\| \tag{60.14}$$

Comparînd (60.13) cu (60.14) vedem că matricele potențialelor H_{el} și Φ_{mec} sînt legate, în deplină concordanță cu ecuația (60.7), prin relația

$$\left\| \begin{matrix} -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial T^2)_0 & -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial T\partial\widetilde{\boldsymbol{D}})_0 & -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial T\partial\boldsymbol{\sigma})_0 \\ -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial\widetilde{\boldsymbol{D}}\partial T)_0 & -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial\widetilde{\boldsymbol{D}}\partial\widetilde{\boldsymbol{D}})_0 & -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial\widetilde{\boldsymbol{D}}\partial\boldsymbol{\sigma})_0 \\ -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial\boldsymbol{\sigma}\partial T)_0 & -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial\boldsymbol{\sigma}\partial\widetilde{\boldsymbol{D}})_0 & -(\partial^2\Phi_{mec}/\partial\boldsymbol{\sigma}\partial\boldsymbol{\sigma})_0 \end{matrix} \right\|^{-1} =$$

$$= \left\| \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix} \right\| \left\| \begin{matrix} (\partial^2H_{el}/\partial S^2)_0 & (\partial^2H_{el}/\partial S\partial\boldsymbol{E})_0 & (\partial^2H_{el}/\partial S\partial\boldsymbol{\varepsilon})_0 \\ (\partial^2H_{el}/\partial\boldsymbol{E}\partial S)_0 & (\partial^2H_{el}/\partial\boldsymbol{E}\partial\boldsymbol{E})_0 & (\partial^2H_{el}/\partial\boldsymbol{E}\partial\boldsymbol{\varepsilon})_0 \\ (\partial^2H_{el}/\partial\boldsymbol{\varepsilon}\partial S)_0 & (\partial^2H_{el}/\partial\boldsymbol{\varepsilon}\partial\boldsymbol{E})_0 & (\partial^2H_{el}/\partial\boldsymbol{\varepsilon}\partial\boldsymbol{\varepsilon})_0 \end{matrix} \right\| \left\| \begin{matrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix} \right\|. \tag{60.15}$$

Unele elemente ale matricelor din formulele (60.13) și (60.14) sînt nu numai numere, ci și vectori și tensori; în particular, două dintre cele trei unități din matricele E ale formulei (60.15) sînt tensori.

§ 61. DEPENDENȚA COEFICIENȚILOR TERMODINAMICI DE CONDIȚIILE DE MĂSURARE

După cum se știe, coeficienții care caracterizează proprietățile substanțelor depind — și uneori substanțial — de condițiile în care acestea sînt măsurate: căldura specifică măsurată la volum constant nu este egală cu căldura specifică măsurată la presiune constantă; comprimarea adiabatică nu este egală cu cea izotermică.

Cristalele nu fac excepţie de la aceste reguli : astfel, proprietăţile mecanice ale unui cristal depind de condiţiile electrice în care se află cristalul (armăturile scurtcircuitate sau nescurtcircuitate ale lamelei piezoelectrice), iar proprietăţile electrice — de condiţiile mecanice (lamela poate sau nu să se deformeze liber).

Vom pleca de la sistemul coeficienţilor termodinamici, generat de potenţialul termodinamic Φ, adică de la ecuaţiile de definiţie (relaţiile (60.12))

$$\Sigma = \frac{C_p}{T_0}\Theta + p_k E_k + \alpha_\mu \sigma_\mu, \tag{61.1, a}$$

$$\widetilde{D}_i = p_i \Theta + \frac{1}{4\pi}\varkappa_{ik} E_k + d_{i\mu}\sigma_\mu, \tag{61.1, b}$$

$$\varepsilon_\lambda = \alpha_\lambda \Theta + d_{k\lambda} E_k + s_{\lambda\mu}\sigma_\mu. \tag{61.1, c}$$

Coeficienţii $\varkappa_{ik}$, $s_{\lambda\mu}$, $d_{i\mu}$ se măsoară la temperatura constantă. Să calculăm valorile acestor coeficienţi cînd sînt determinaţi în condiţii adiabatice, şi nu în condiţii izotermice.

În cazul unui proces adiabatic, entropia este constantă, iar temperatura variază. Variaţia ei se obţine uşor din ecuaţia (61.1, a)

$$\Theta = \frac{T_0}{C_p}\Sigma - \frac{T_0}{C_p} p_k E_k - \frac{T_0}{C_p}\alpha_\mu \sigma_\mu \tag{61.2, a}$$

(pentru generalitate nu considerăm aici $\Sigma = 0$, avînd în vedere că entropia poate să se menţină constantă, dar nu egală cu S_0). Să înlocuim valoarea obţinută a lui Θ în ecuaţiile (61.1, b) şi (61.1,c)

$$\widetilde{D}_i = \frac{T_0}{C_p} p_i \Sigma + \left(\frac{1}{4\pi}\varkappa_{ik} - \frac{T_0}{C_p} p_i p_k\right) E_k + \left(d_{i\mu} - \frac{T_0}{C_p} p_i \alpha_\mu\right)\sigma_\mu, \tag{61.2, b}$$

$$\varepsilon_\lambda = \frac{T_0}{C_p}\alpha_\lambda \Sigma_\nu + \left(d_{k\lambda} - \frac{T_0}{C_p} p_k \alpha_\lambda\right) E_k + \left(s_{\lambda\mu} - \frac{T_0}{C_p}\alpha_\lambda \alpha_\mu\right)\sigma_\mu. \tag{61.2, c}$$

De aici căpătăm valorile adiabatice ale coeficienţilor

$$\varkappa_{ik}^{(S)} = \varkappa_{ik} - \frac{4\pi T_0}{C_p} p_i p_k, \quad s_{\lambda\mu}^{(S)} = s_{\lambda\mu} - \frac{T_0}{C_p} \alpha_\lambda \alpha_\mu,$$

$$d_{i\mu}^{(S)} = d_{i\mu} - \frac{T_0}{C_p} p_i \alpha_\mu. \qquad (61.3)$$

Aşadar, permitivitatea dielectrică adiabatică şi coeficienţii piezoelectrici adiabatici se deosebesc de cei izotermici numai în cazul cristalelor piroelectrice. Cu toate că unii coeficienţi adiabatici ai deformabilităţii elastice se deosebesc de coeficienţii izotermici corespunzători, practic, pentru toate corpurile, la toate cristalele cu o simetrie suficient de înaltă, o parte dintre coeficienţii adiabatici coincid cu cei izotermici (de exemplu, în cazul cristalelor cubice $s_{44}^{(S)} = s_{44}$). Formulele (61.3) mai arată că coeficienţii adiabatici diagonali ai permitivităţii dielectrice ($\varkappa_{11}$, $\varkappa_{22}$, $\varkappa_{33}$) şi ai deformabilităţii elastice (s_{11}, $s_{22}, \ldots, s_{66}$) nu sînt mai mari decît coeficienţii izotermici de acelaşi nume; această afirmaţie, ca şi alte inegalităţi termodinamice, este valabilă într-un sistem arbitrar de coordonate.

Formulele (61.2) definesc, de fapt, matricea termodinamică pentru entalpia $H = \Phi + TS$, care este un potenţial termodinamic în raport cu variabilele S, $\boldsymbol{E}$, σ. Mai mult decît atît, elementele acestei matrice se exprimă prin mărimi ce pot fi bine măsurate experimental, şi anume, elementele matricei M.

Evident, în cazul în care se face substituţia uneia dintre variabilele independente, totdeauna se poate acţiona într-un mod asemănător. Să examinăm acum cazul în care se face substituţia nu a unei singure variabile independente, ci a trei variabile independente simultan: să calculăm coeficienţii C_p, $s_{\lambda\mu}$ şi α_λ, nu pentru cazul în care cîmpul electric este constant, ca în ecuaţiile (61.1), ci în cazul în care inducţia este constantă. În acest scop să rezolvăm sistemul de ecuaţii (61.1,b) în raport cu componentele vectorului $\boldsymbol{E}$. Să calculăm mai întîi tensorul $\boldsymbol{\eta}^* = \boldsymbol{\varkappa}^{-1}$ — tensorul impermitivităţii dielectrice, măsurat într-un proces izotermic şi pentru tensiuni constante. Cu ajutorul acestui tensor găsim

$$E_k = -4\pi\eta_{kl}^* p_l \Theta + 4\pi\eta_{kl}^* \widetilde{D}_l - 4\pi\eta_{kl}^* d_{l\mu} \sigma_\mu, \qquad (61.4,\ b)$$

iar apoi, substituind această expresie în (61.1, a) şi (61.1, c) obţinem

$$\Sigma = (C_p/T - 4\pi\eta_{kl}^* p_k p_l)\,\Theta + 4\pi\eta_{kl}^* p_k \widetilde{D}_l + (\alpha_\mu - 4\pi\eta_{kl}^* p_k d_{l\mu})\,\sigma_\mu, \qquad (61.4,\ a)$$

$$\varepsilon_\lambda = (\alpha_\lambda - 4\pi\eta_{kl}^* p_l d_{k\lambda})\,\Theta + 4\pi\eta_{kl}^* d_{k\lambda} \widetilde{D}_l + (s_{\lambda\mu} - 4\pi\eta_{kl}^* d_{k\lambda} d_{l\lambda})\,\sigma_\mu. \qquad (61.4,\ c)$$

Ecuaţiile (61.4) determină o matrice care corespunde potenţialului termodinamic

$$\Phi_{\text{mec}} = \Phi + \boldsymbol{E} \cdot \widetilde{\boldsymbol{D}}.$$

Se observă că coeficienţii termodinamici, în cazul unei inducţii constante, diferă de coeficienţii analogi pentru un cîmp electric constant, numai în cazul cristalelor piroelectrice (C_p şi α_λ) şi al celor piezoelectrice ($s_{\lambda\mu}$).

Calcularea erorilor care apar la trecerea de la coeficienţii izotermici la cei adiabatici şi de la coeficienţii măsuraţi în cîmp constant la coeficienţii măsuraţi pentru inducţie constantă arată că la majoritatea covîrşitoare a cristalelor (însă aceasta nu se referă la cristalele seignettoelectrice), erorile sînt mici, cea mai mare fiind de ordinul a 1%. Excepţie fac coeficienţii piroelectrici măsuraţi în cazul unei deformaţii constante şi în cazul unei tensiuni constante: diferenţa dintre ele este de acelaşi ordin ca şi coeficienţii înşişi. Pentru a o determina calculăm, din ecuaţia

$$s_{\lambda\mu} c^*_{\mu\nu} = \delta_{\lambda\nu}$$

coeficienţii $c^*_{\lambda\mu}$—coeficienţii de elasticitate pentru un proces izotermic în cîmp electric constant. Rezolvînd cu ajutorul acestor coeficienţi ecuaţia (61.1, c) în raport cu σ_μ, găsim

$$\sigma_\mu = - c^*_{\mu\nu}\alpha_\nu\Theta - c^*_{\mu\nu} d_{k\nu} E_k + c^*_{\mu\nu}\varepsilon_\nu \qquad (61.5,\ c)$$

şi înlocuind pe σ_μ în (61.1, a) şi (61.1, b), obţinem

$$\Sigma = \left(\frac{C_p}{T} - c^*_{\mu\nu}\alpha_\mu\alpha_\nu\right)\Theta + (p_k - c^*_{\mu\nu}\alpha_\mu d_{k\nu})\, E_k + c^*_{\mu\nu}\alpha_\mu\varepsilon_\nu, \qquad (61.5,\ a)$$

$$\widetilde{D}_i = (p_i - d_{i\mu}c^*_{\mu\nu}\alpha_\nu)\,\Theta + (\tilde{\varkappa}_{ik} - d_{i\mu}c^*_{\mu\nu}d_{k\nu})\, E_k + d_{i\mu}c^*_{\mu\nu}\varepsilon_\nu. \qquad (61.5,b)$$

Prin urmare, coeficienţii piroelectrici pentru o deformaţie constantă sînt egali cu

$$p_i^{(\varepsilon)} = p_i - d_{i\mu}c^*_{\mu\nu}\alpha_\nu. \qquad (61.6)$$

În cazul tuturor cristalelor piroelectrice, coeficienţii măsuraţi pentru o tensiune constantă se deosebesc într-o anumită măsură de coeficienţii măsuraţi în cazul unor deformaţii constante, deoarece toate cristalele piroelectrice sînt cristale piezoelectrice.

În condițiile obișnuite ale experiențelor din fizică sau ale aplicațiilor tehnice ale cristalelor, de regulă nu există posibilitatea aplicării asupra unui cristal a tuturor forțelor termodinamice pe care ni le putem imagina. Dacă, de exemplu, un cristal se utilizează sub formă de lamelă dielectrică într-un condensator plan, intensitatea cîmpului electric din interiorul său este perpendiculară pe planul lamelei. Dispozitivele cu care se face solicitarea permit, la rîndul lor, de obicei, să se obțină numai unele configurații particulare ale tensiunilor ; în cazul special al lamelei, acestea pot fi, de pildă, tensiuni de comprimare și de întindere, orientate după normala $\boldsymbol{n}$ la planul lamelei, sau după o direcție oarecare $\boldsymbol{q}$, perpendiculară pe această normală ($\boldsymbol{n}$ și $\boldsymbol{q}$ fiind vectorii unitari). În aceste condiții, potențialul termodinamic al cristalului depinde, în fond, numai de cele trei variabile (T, $\boldsymbol{E}$, σ), nu de zece, ca în cazul general. Este evident că și toate celelalte potențiale termodinamice vor trebui să fie determinate, în acest caz, numai de cele trei variabile independente corespunzătoare, cu toate că, în general, sînt diferite de zero toate componentele vectorului inducție și ale tensorului deformărilor. De fapt, deosebit de importantă, fiind esențială, este numai o singură componentă a vectorului inducție ($\widetilde{\boldsymbol{D}}\cdot\boldsymbol{n}$) și tot o singură componentă a tensorului deformărilor ($\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{n}$ sau $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{q}$), toate celelalte sînt univoc determinate de către ele (împreună cu temperatura sau entropia).

Să examinăm, de exemplu, efectul piroelectric într-o lamelă cristalină tăiată astfel încît vectorul coeficienților piroelectrici să fie normal la planul lamelei, adică $\boldsymbol{p} = p\boldsymbol{n}$. Dacă armăturile sînt scurtcircuitate și lamelei nu i se aplică nici un fel de tensiuni, atunci coordonatele termodinamice generalizate sînt egale cu

$$\Sigma = (C_p/T_0)\,\Theta, \tag{61.7, a}$$

$$\boldsymbol{n}\cdot\widetilde{\boldsymbol{D}} = p\Theta, \tag{61.7, b}$$

$$\boldsymbol{nn} : \boldsymbol{\varepsilon} = (\boldsymbol{nn} : \boldsymbol{\alpha})\,\Theta. \tag{61.7, c}$$

Densitatea de sarcină pe o armătură este egală cu

$$\rho_{\text{supr}} = \boldsymbol{n}\cdot\widetilde{\boldsymbol{D}} = p\Theta, \tag{61.8}$$

din care se și determină coeficientul piroelectric p pentru tensiunile constante (și egale cu zero).

Să aplicăm acum lamelei o tensiune de comprimare, $\boldsymbol{\sigma} = \sigma\boldsymbol{nn}$, astfel încît grosimea ei să nu se modifice prin creșterea tempera-

turii. Cîmpul electric în lamelă, ca şi pînă acum, este egal cu zero, astfel încît

$$\Sigma = (C_p/T_0)\,\Theta + (\boldsymbol{\alpha} : \boldsymbol{nn})\,\sigma, \qquad (61.9,\ a)$$

$$\boldsymbol{n}\cdot\widetilde{\boldsymbol{D}} = p\Theta + (\boldsymbol{n}\cdot\mathrm{d} : \boldsymbol{nn})\,\sigma, \qquad (61.9,\ b)$$

$$\boldsymbol{nn} : \varepsilon = (\boldsymbol{nn} : \boldsymbol{\alpha})\,\Theta + (\boldsymbol{nn} : \mathrm{s} : \boldsymbol{nn})\sigma. \qquad (61.9,\ c)$$

Întrucît grosimea lamelei rămîne neschimbată, $\boldsymbol{nn} : \varepsilon = 0$ şi din (61.9, c) deducem

$$\sigma = -\frac{\boldsymbol{nn} : \boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{nn} : \mathrm{s} : \boldsymbol{nn}}\,\Theta, \qquad (61.10,\ c)$$

iar înlocuindu-l pe σ în (61.9, a) şi (61.9, b), vom avea încă două ecuaţii

$$\Sigma = \left[\frac{C_p}{T_0} - \frac{(\boldsymbol{nn} : \boldsymbol{\alpha})^2}{\boldsymbol{nn} : \mathrm{s} : \boldsymbol{nn}}\right]\Theta, \qquad (61.10,\ a)$$

$$\boldsymbol{n}\cdot\widetilde{\boldsymbol{D}} = \left[p - \frac{(\boldsymbol{nn} : \boldsymbol{\alpha})(\boldsymbol{n}\cdot\mathrm{d} : \boldsymbol{nn})}{\boldsymbol{nn} : \mathrm{s} : \boldsymbol{nn}}\right]\Theta. \qquad (61.10,\ b)$$

Evident, rolul de coeficient piroelectric îl are, în aceste condiţii, coeficientul lui Θ din ecuaţia (61.10, b); este firesc să-l notăm cu $p_{(\boldsymbol{nn}:\,\varepsilon)}$. Subliniem faptul că acesta nu este coeficientul piroelectric pentru deformaţii constante: sînt constante componenta tensorului deformaţiilor, $\boldsymbol{nn} : \varepsilon$, precum şi toate componentele tensorului tensiunilor, diferite de $\boldsymbol{nn} : \boldsymbol{\sigma}$.

Analiza altor experienţe asemănătoare se efectuează analog. Ca şi în exemplul examinat, totdeauna este necesar să se urmărească cu atenţie care anume componente ale vectorilor $\boldsymbol{E}$ şi $\widetilde{\boldsymbol{D}}$ ale tensorilor $\boldsymbol{\sigma}$ şi $\boldsymbol{\varepsilon}$ rămîn constante în condiţiile experienţei.

Să calculăm acum elementele matricei entalpiei electrice, H_{el}; ele ne vor fi necesare în § 62 pentru calcularea corecţiilor piezoelectrice ale vitezelor de propagare a undelor elastice în cristale. Deoarece elementele de matrice ale entalpiei, H, au fost deja deduse (v. relaţiile (61.2)), vom pleca de la definiţia

$$H_{el} = H + \sigma_\lambda \varepsilon_\lambda,$$

Va trebui deci să începem cu calcularea matricei inverse lui $s^{(S)}_{\lambda\mu}$ (v. (61.3)), adică cu rezolvarea sistemului de ecuații

$$[s_{\lambda\mu} - (T_0/C_p)\, \alpha_\lambda \alpha_\mu]\, c^{(E)}_{\mu\varkappa} = \delta_{\lambda\varkappa} \qquad (61.11)$$

în raport cu $c^{(E)}_{\mu\varkappa}$ care sînt coeficienții de elasticitate adiabatici la intensitatea constantă a cîmpului electric. Aceasta permite rezolvarea în raport cu σ_λ a ecuației (61.2, c)

$$\sigma_\lambda = -(T_0/C_p)\, c^{(E)}_{\lambda\mu} \alpha_\mu \Sigma - c^{(E)}_{\lambda\mu} d^{(S)}_{k\mu} E_k + c^{(E)}_{\lambda\mu}\, \varepsilon_\mu. \qquad (61.12,\ c)$$

Coeficienții lui Σ, E_k, ε_μ formează cele șase linii inferioare ale matricei entalpiei electrice. Celelalte elemente ale sale vor fi obținute înlocuind relația (61.12, c) în (61.2, a) și (61.2, b) și grupînd coeficienții lui Σ, E_k și ε_λ

$$\Theta = (T_0/C_p)[1 + (T_0/C_p)\, \alpha_\lambda c^{(E)}_{\lambda\mu} \alpha_\mu]\, \Sigma -$$

$$- (T_0/C_p)(p_k - \alpha_\lambda c^{(E)}_{\lambda\mu} d^{(S)}_{k\mu})\, E_k - (T_0/C_p)\, \alpha_\lambda c^{(E)}_{\lambda\mu}\, \varepsilon_\mu, \qquad (61.12,\ a)$$

$$\widetilde{D}_i = (T_0/C_p)(p_i - d^{(S)}_{i\lambda} c^{(E)}_{\lambda\mu} \alpha_\mu)\, \Sigma +$$

$$+ (\widetilde{\varkappa}^{(S)}_{ik} - d^{(S)}_{i\lambda} c^{(E)}_{\lambda\mu} d^{(S)}_{k\mu})\, E_k + d^{(S)}_{i\lambda} c^{(E)}_{\lambda\mu}\, \varepsilon_\mu. \qquad (61.12,\ b)$$

Acești coeficienți vor și forma cele patru linii superioare ale matricei căutate; trebuie numai înmulțite liniile care corespund vectorului $\widetilde{\boldsymbol{D}}$ cu -1 (v. formulele (60.13)).

Pentru un proces adiabatic, $\Sigma = 0$, formulele (61.12, c) putînd fi scrise sub forma

$$\widetilde{D}_i = \widetilde{\varkappa}^{(S,\,E)}_{ik} E_k + e_{i\mu} \varepsilon_\mu,$$

$$\sigma_\lambda = -\, e_{k\lambda} E_k + c^{(E)}_{\lambda\mu}\, \varepsilon_\mu\,; \qquad (61.13)$$

coeficienții termodinamici nou introduși sînt legați de derivatele secunde ale potențialului termodinamic prin relațiile (61.11) și prin

$$\widetilde{\varkappa}^{(S,\,E)}_{ik} = \varkappa_{ik} - d_{i\lambda} c^{(E)}_{\lambda\mu} d_{k\mu} - (T_0/C_p)\, p_i p_k +$$

$$+ (T_0/C_p)(p_i \alpha_\lambda c^{(E)}_{\lambda\mu} d_{k\mu} + d_{i\lambda} c^{(E)}_{\lambda\mu} \alpha_\mu p_k) - (T_0/C_p)^2 p_i \alpha_\lambda c^{(E)}_{\lambda\mu} \alpha_\mu p_k, \qquad (61.14)$$

$$e_{i\mu} = [d_{i\lambda} - (T_0/C_p)\, p_i \alpha_\lambda]\, c^{(E)}_{\lambda\mu}. \qquad (61.15)$$

Exemplele analizate arată că determinînd experimental elementele unei singure matrice termodinamice, se pot apoi calcula toate celelalte matrice termodinamice. Astfel, calculînd tensorul

$$\eta = [\varkappa^{(S,\,\varepsilon)}]^{-1},$$

în care $\varkappa^{(S,\,\varepsilon)}$ este setul coeficienţilor lui $\boldsymbol{E}$ din formula (61.1, b), putem să-l exprimăm pe $\boldsymbol{E}$ în funcţie de Σ, $\widetilde{\boldsymbol{D}}$ şi ε, şi înlocuind apoi valoarea găsită pentru $\boldsymbol{E}$ în (61.1, a) şi (61.1, c) să-i exprimăm sub formă de funcţii de Σ, $\widetilde{\boldsymbol{D}}$ şi ε şi de Θ şi σ. Comparînd expresiile obţinute cu formulele (60.12) coeficienţii termodinamici T_0/C_v, η_{ik}, $c_{\lambda\mu}$, β_λ, q_i şi $h_{i\mu}$, care sînt derivatele de ordinul doi ale energiei interne, se pot exprima prin derivatele de ordinul doi ale potenţialului termodinamic, C_p/T_0, $\varkappa_{ik}$, $s_{\lambda\mu}$, p_i, α_λ, $d_{i\mu}$. Practic însă lucrurile nici pe departe nu sînt atît de simple. Datele experimentale au o precizie limitată. Deja prin calculul făcut pe baza datelor experimentale pentru elementele primei matrice termodinamice precizia se micşorează substanţial, în cadrul calculelor ulterioare scăzînd tot mai mult. Din această cauză, făcînd astfel de calcule este necesar să se evalueze cu precauţie precizia rezultatelor obţinute. În scopul micşorării erorilor, este bine să se plece nu de la minimul necesar de date experimentale, ci de la un sistem excedentar de date. Desigur, în acest caz, calculele se complică, însă rezultatele lor sînt mai veridice. Metodica unor astfel de calcule, luînd special ca exemplu tocmai calcule cristalografice, a fost descris de Nye (1967).

§ 62. UNDE ELASTICE ÎN CRISTALELE PIEZOELECTRICE

Pentru studiul particularităţilor de propagare a undelor elastice în cristalele piezoelectrice trebuie analizate soluţiile sistemului reunit al ecuaţiilor elastodinamicii şi al ecuaţiilor electrostaticii. Folosindu-ne de ecuaţiile electrostaticii în locul ecuaţiilor electrodinamicii, comitem desigur o eroare; ca ordin de mărime, aceasta este egală cu pătratul raportului dintre viteza sunetului în cristal şi viteza luminii, deci complet neglijabilă.

Sistemul pe care trebuie să-l rezolvăm este următorul

$$\operatorname{Div} \boldsymbol{\sigma} = \rho \ddot{\boldsymbol{u}}, \tag{62.1}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{D} = 0. \tag{62.2}$$

Ecuaţiile $\operatorname{rot} \boldsymbol{E} = 0$ şi $\operatorname{Ink} \varepsilon = 0$ pot fi satisfăcute identic dacă tensorul tensiunilor, $\boldsymbol{\sigma}$, şi vectorul inducţiei electrică, $\boldsymbol{D}$, sînt expri-

mați prin potențialul φ și vectorul deplasare, $\boldsymbol{u}$. Pentru aceasta trebuie să folosim matricea acelui potențial termodinamic, care să fie funcție de vectorul intensitate a cîmpului electric, $\boldsymbol{E} = -\text{grad}\ \varphi$, de tensorul deformațiilor $\varepsilon = \text{Def}\ \boldsymbol{u}$ și, în fine, de entropia, S, dat fiind că propagarea undelor elastice este un proces adiabatic. Un asemenea potențial termodinamic este potențialul

$$H_{\text{el}} = U - \boldsymbol{E} \cdot \tilde{\boldsymbol{D}},$$

studiat amănunțit în paragraful precedent. Expresiile deduse acolo, (61.13), este convenabil să fie transcrise în forma

$$D_i = -\varkappa_{ik}^{(S,\,\varepsilon)} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} + 4\pi e_{ikl} \frac{\partial \mu_k}{\partial x_l}, \tag{62.3}$$

$$\sigma_{ij} = e_{kij} \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} + c_{ijkl}^{(E)} \frac{\partial \mu_k}{\partial x_l} \tag{62.4}$$

(în formulele care urmează, în loc de $\varkappa_{ik}^{(S,\,\varepsilon)}$ și $c_{ijkl}^{(E)}$ vom scrie $\varkappa_{ik}$ și c_{ijkl}). Aici tensorul $\varepsilon = \text{Def}\ \boldsymbol{u}$ este înlocuit cu tensorul $\partial \boldsymbol{u}/\partial \boldsymbol{r}$, pentru că prin înmulțirea cu tensorii $\mathbf{c}$ și $\mathbf{e}$, simetrici în raport cu ultimii doi indici, ambii dau rezultate asemănătoare. Componentele e_{ikl} ale tensorului $\mathbf{e}$ sînt legate de coeficienții $e_{i\mu}$ prin relațiile (v. anexa F)

$$e = e_{ikl} \qquad (kl \leftrightarrow \mu = 1, \cdots, 6).$$

Substituind expresiile (62.4) și (62.3) în ecuațiile (62.1) și respectiv, (62.2), obținem un sistem de ecuații diferențiale cu derivate parțiale, de ordinul doi, în raport cu funcțiile $u_i(\boldsymbol{r}, t)$ și $\varphi\ (\boldsymbol{r}, t)$

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} + e_{kij} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_k \partial x_i} = \rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2}, \tag{62.5}$$

$$-\varkappa_{ik} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_k} + 4\pi e_{ikl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} = 0. \tag{62.6}$$

Utilizînd notațiile din § 56 și notînd cu $A\xi$ amplitudinea potențialului, vom scrie undele plane de deplasare și cele ale potențialului, intim legate între ele

$$\boldsymbol{u} = A\boldsymbol{p} \exp[(2\pi \mathrm{i}/\lambda)(\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{r} - vt)],$$

$$\varphi = A\xi \exp[2\pi \mathrm{i}/\lambda(\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{r} - vt)].$$

Înlocuindu-le în ecuațiile (62.5) și (62.6), obținem

$$M_{jk}p_k + \xi g_j = \rho v^2 p_j, \quad \boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{p} + \xi\boldsymbol{g} = \rho v^2\boldsymbol{p}; \tag{62.7}$$

$$-\xi K + 4\pi g_k p_k = 0, \quad -\xi K + 4\pi\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{p} = 0, \tag{62.8}$$

unde introducem notațiile

$$M_{jk} = e_{ijkl}m_i m_l, \quad \boldsymbol{M} = \boldsymbol{m}\cdot\mathbf{c}\cdot\boldsymbol{m};$$

$$g_k = e_{ikl}m_i m_l, \quad \boldsymbol{g} = \boldsymbol{m}\cdot\mathbf{e}\cdot\boldsymbol{m};$$

$$K = \varkappa_{il}m_i m_l, \quad K = \boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{m}.$$

Prin urmare, pe lîngă tensorul Christoffel, **M** (v. § 56), aici se introduce vectorul $\boldsymbol{g}$ și scalarul K, analogi tensorului **M**. Din (62.8) obținem

$$\xi = \frac{4\pi}{K}g_k p_k = \frac{4\pi}{K}\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{p}$$

și, înlocuind aceasta în (62.7), deducem

$$\left(M_{jk} + \frac{4\pi}{K}g_j g_k\right)p_k = \rho v^2 p_j, \quad \left(\mathbf{M} + \frac{4\pi}{K}\boldsymbol{gg}\right)\cdot\boldsymbol{p} = \rho v^2\boldsymbol{p}. \tag{62.9}$$

Este potrivit ca acest sistem de ecuații să se numească ecuațiile Christoffel ale cristalului piezoelectric. Așadar, toată deosebirea față de cazul undelor elastice s-a redus pentru cristalul piezoelectric la înlocuirea tensorului Christoffel obținut, **M**, cu tensorul $\mathbf{M} + (4\pi/K)\boldsymbol{gg}$.

Să examinăm, spre exemplu, propagarea undelor elastice într-un cristal din clasa 2, de-a lungul unei axe de ordinul doi, X_2. Calculul componentelor tensorului **M** se simplifică foarte mult datorită faptului că în acest caz $M_{jk} = c_{2jk2}$. De aici (v. tabelul E.18)

$$M_{11} = c_{66}, \quad M_{22} = c_{22}, \quad M_{33} = c_{44},$$

$$M_{23} = 0, \quad M_{31} = c_{46}, \quad M_{12} = 0.$$

Componentele vectorului $\boldsymbol{g}$ sînt, în acest caz, egale cu $g_j = e_{2j2}$. Conform tabelului E.11

$$g_1 = 0, \quad g_2 = e_{22}, \quad g_3 = 0.$$

În sfîrșit, $K = \varkappa_{22}$. Ecuațiile Christoffel, (62.9), capătă forma

$$c_{66}p_1 + c_{46}p_3 = \rho v^2 p_1,$$

$$(c_{22} + 4\pi e_{22}^2/\varkappa_{22})p_2 = \rho v^2 p_2,$$

$$c_{46}p_1 + c_{44}p_3 = \rho v^2 p_3.$$

În cadrul lor este clar că în acest caz se schimbă numai viteza undelor longitudinale, devenind egală cu

$$v = \sqrt{\frac{1}{\rho}\left(c_{22} + \frac{4\pi e_{22}^2}{\varkappa_{22}}\right)} \approx v_0\left(1 + \frac{1}{2}\,\frac{4\pi e_{22}^2}{\varkappa_{22}c_{22}}\right),$$

unde v este viteza calculată fără considerarea efectului piezoelectric. Raportul $4\pi e_{22}^2/(\varkappa_{22}c_{22})$ joacă aici rolul pătratului coeficientului cuplajului electromecanic.

Drept un al doilea exemplu, ceva mai complicat, vom examina propagarea undelor elastice într-un cristal din clasa m, după direcția normalei la planul de simetrie; aceasta va fi din nou axa X_2. Tensorul $\mathbf{M}$ și scalarul K sînt calculați deja în exemplul precedent. Componentele vectorului $\boldsymbol{g}$ sînt, ca și mai înainte, egale cu $g_j = e_{2j2}$, însă acum, din tabelul E.11, găsim

$$g_1 = e_{26}, \; g_2 = 0, \qquad g_3 = e_{24}.$$

Din această cauză, ecuațiile Christoffel capătă forma

$$\left(c_{66} + \frac{4\pi e_{26}^2}{\varkappa_{22}}\right)p_1 + \left(c_{46} + \frac{4\pi e_{26}e_{24}}{\varkappa_{22}}\right)p_3 = \rho v^2 p_1,$$

$$c_{22}p_2 = \rho v^2 p_2,$$

$$\left(c_{46} + \frac{4\pi e_{26}e_{24}}{\varkappa_{22}}\right)p_1 + \left(c_{44} + \frac{4\pi e_{24}^2}{\varkappa_{22}}\right)p_3 = \rho v^2 p_3.$$

Este clar că în acest caz corecția piezoelectrică a vitezei undelor longitudinale este egală cu zero, schimbîndu-se însă vitezele și direcțiile de polarizare ale undelor transversale.

§ 63. INEGALITĂȚI TERMODINAMICE

Într-un proces ireversibil entropia corpului variază nu numai datorită transferului acesteia de la corpurile înconjurătoare către corpul considerat, sau invers, ci și datorită faptului că entropia ia naștere în corpul însuși. Aceasta se exprimă prin inegalitatea

$$\frac{dS}{dt} - \frac{1}{T}\frac{dQ}{dt} \geqslant 0, \tag{63.1}$$

care reprezintă una dintre formulările posibile ale principiului al doilea al termodinamicii. Pe de altă parte, conform principiului întîi al termodinamicii, viteza transferului de căldură este

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{dU}{dt} - \boldsymbol{E} \cdot \frac{d\widetilde{\boldsymbol{D}}}{dt} - \boldsymbol{\sigma} : \frac{d\varepsilon}{dt}. \qquad (63.2)$$

Utilizînd faptul că temperatura absolută, T, este pozitivă, din (63.1) și (63.2) obținem inegalitatea

$$\frac{dU}{dt} - T\frac{dS}{dt} - \boldsymbol{E} \cdot \frac{d\widetilde{D}}{dt} - \boldsymbol{\sigma} : \frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{dU}{dt} - X_A\frac{dx_A}{dt} \leqslant 0. \qquad (63.3)$$

Dacă sistemul nu se află în stare de echilibru termodinamic potențialul termodinamic $\Phi = U - X_A x_A$ depinde nu numa de forțele termodinamice generalizate, X_A, ci și de alte argumente, astfel încît viteza sa de variație, cînd forțele termodinamice sînt constante, este egală cu

$$\left(\frac{d\Phi}{dt}\right)_X = \frac{d}{dt}(U - X_A x_A)_X = \frac{dU}{dt} - X_A\frac{dx_A}{dt}. \qquad (63.4)$$

Comparînd această relație cu (63.3), obținem

$$\left(\frac{d\Phi}{dt}\right)_X \leqslant 0 \qquad (63.5)$$

adică pentru forțe termodinamice constante, potențialul termodinamic Φ al sistemului de neechilibru se micșorează, iar al sistemului de echilibru rămîne neschimbat. Cu alte cuvinte, starea de echilibru termodinamic se deosebește de toate celelalte stări ale unei substanțe, definite prin aceleași forțe termodinamice generalizate, prin aceea că în starea de echilibru potențialul termodinamic atinge valoarea sa minimă; așa că orice abateri posibile față de această valoare trebuie să fie pozitive

$$(\delta\Phi)_X > 0. \qquad (63.6)$$

Cînd se compară potențialul termodinamic al unei stări de echilibru cu potențialele termodinamice ale unor stări de neechilibru, vecine stării de echilibru, este necesar să se țină cont că stările de

neechilibru nu sînt determinate numai prin definirea celor 10 forțe generalizate, ci depind și de alți parametri. Dacă asemenea parametri vor fi coordonatele generalizate, atunci

$$(\delta\Phi)_X = \delta(U - X_A x_A)_X = \frac{\partial U}{\partial x_A}\delta x_A + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 U}{\partial x_A \partial x_B}\delta x_A \delta x_B - X_A \delta x_A.$$

Funcția U se dezvoltă în serie pînă la termenii de ordinul doi, deoarece termenii de ordinul întîi se reduc reciproc

$$\frac{\partial U}{\partial x_A} - X_A = 0.$$

Prin urmare, din (63.6) rezultă inegalitatea

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_A \partial x_B}\delta x_A \delta x_B > 0. \tag{63.7}$$

Riguros vorbind, pentru ca să fie satisfăcută condiția (63.6) este suficient ca forma pătratică

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_A \partial x_B}\delta x_A \delta x_B$$

să nu fie negativă, iar pentru valorile lui x_A pentru care ea se anulează să fie egală cu zero forma de ordinul trei și pozitivă forma de ordinul patru. Forma pătratică devine zero în punctul critic. Excludem acest caz din studiu, astfel încît toate concluziile ulterioare sînt adevărate în presupunerea că starea cristalului nu este critică.

Dacă derivatele parțiale $\partial^2 U/\partial x_A \partial x_B$ se calculează pentru $y_A = 0$ $(A = 0, \ldots, 9)$, atunci ele trec în elementele matricei termodinamice, N. Din această cauză, drept caz particular al inegalității (63.7) trebuie să fie adevărată inegalitatea

$$N_{AB}\delta x_A \delta x_B > 0. \tag{63.8}$$

Întrucît creșterile δx_A sînt arbitrare, pentru ca inegalitatea (63.8) să fie adevărată este necesar ca matricea N să fie pozitiv definită.

După cum se știe, o matrice pozitiv definită are totdeauna o matrice inversă, aceasta fiind, la rîndul ei, de asemenea, definită pozitiv. Așadar, și matricea M este definită pozitiv.

Conform teoremei lui Silvestre toți minorii principali ai matricelor pozitiv definite sînt pozitivi. Se numesc *minori principali*

ai unei matrice determinantul matricei însăși și toți determinanții obținuți din matrice prin omiterea liniilor și coloanelor cu același ordin (de exemplu, omiterea primei linii și a primei coloane, sau a ultimelor trei linii și a ultimelor trei coloane etc.). În particular, este minor principal orice element care se află pe diagonala principală a matricei. Din această cauză, în matricele termodinamice M și N toți coeficienții care se află pe diagonala principală sînt esențial pozitivi

$$C_p > 0, \quad C_v > 0,$$

$$\varkappa_{11} > 0, \quad \varkappa_{22} > 0, \quad \varkappa_{33} > 0, \quad \eta_{11} > 0, \quad \eta_{22} > 0, \quad \eta_{33} > 0,$$

$$s_{11} > 0, \quad s_{22} > 0, \quad s_{33} > 0, \quad c_{11} > 0, \quad c_{22} > 0, \quad c_{33} > 0, \quad (63.9)$$

$$s_{44} > 0 \quad s_{55} > 0, \quad s_{66} > 0, \quad c_{44} > 0, \quad c_{55} > 0, \quad c_{66} > 0.$$

(în primele două inegalități este folosit faptul că temperatura absolută nu poate fi decît pozitivă). Valorile componentelor tensorilor, la trecerea de la un sistem de coordonate la altul, se schimbă. Deoarece în cadrul demonstrației sistemul de coordonate nu a fost fixat, aceste inegalități sînt adevărate în orice sistem.

De aici rezultă, în particular, că componentele normale $\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{\varkappa} \cdot \boldsymbol{q}$ și $\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{q}$ sînt pozitive pentru orice $\boldsymbol{q}$. Într-adevăr, luînd ca vector unitar versorul $\boldsymbol{e}_1$ al unui sistem de coordonate oarecare, obținem în acest sistem

$$\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{\varkappa} \cdot \boldsymbol{q} = \varkappa_{11} \quad \text{și} \quad \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{q} = \eta_{11}.$$

Analog se deduce și caracterul pozitiv al modulului Young, $E(\boldsymbol{q})$, și al modulului de forfecare la torsiune, $G(\boldsymbol{q})$, pentru orice vector unitar, $\boldsymbol{q}$.

Să examinăm acum minorii principali de ordinul doi. Caracterul lor pozitiv înseamnă că elementele nediagonale ale matricelor M și N trebuie să fie mărginite în valoare absolută. De exemplu, din

$$\begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{12} & s_{22} \end{vmatrix} > 0$$

rezultă

$$s_{12}^2 < s_{11} s_{22}. \quad (63.10)$$

Analog obţinem

$$\varkappa_{12}^2 < \varkappa_{11}\varkappa_{22}. \tag{63.11}$$

Această condiţie limitează chiar şi valoarea absolută a coeficienţilor de dilatare termică, a coeficienţilor piroelectrici şi piezoelectrici. Astfel, din

$$\begin{vmatrix} C_p/T_0 & \alpha_1 \\ \alpha_1 & s_{11} \end{vmatrix} > 0,$$

rezultă pentru coeficientul de dilatare termică inegalitatea

$$\alpha_1^2 < \frac{C_p s_{11}}{T_0}. \tag{63.12}$$

Analog se deduc inegalităţile pentru coeficienţii piroelectrici şi piezoelectrici ; de exemplu,

$$p_1^2 < \frac{C_p \varkappa_{11}}{4\pi\, T_0}, \tag{63.13}$$

$$d_{14}^2 < \frac{\varkappa_{11} s_{44}}{4\pi}. \tag{63.14}$$

Prin acelaşi procedeu se obţin inegalităţile pentru coeficienţii adiabatici — elemente ale matricei N ; de exemplu,

$$c_{12}^2 < c_{11}c_{22}, \tag{63.15}$$

$$\eta_{12}^2 < \eta_{11}\eta_{22}, \tag{63.16}$$

$$\beta_1^2 < \frac{T c_{11}}{C_v}, \tag{63.17}$$

$$q_1^2 < \frac{4\pi T \eta_{11}}{C_v}, \tag{63.18}$$

$$h_{12}^2 < 4\pi\eta_{11}c_{22}. \tag{63.19}$$

Sensul fizic al acestor coeficienţi rezultă din formulele (60.12), tot acolo fiind date şi denumirile lor.

Modul în care se folosesc minorii principali de ordinul trei pentru deducerea inegalităţilor termodinamice îl vom examina luînd ca exemplu proprietăţile elastice ale cristalelor sistemului cubic şi ale corpurilor izotrope.

Caracterul pozitiv al minorilor principali de ordinul întîi dă rezultatul deja cunoscut

$$s_{11} > 0 \tag{63.20}$$

Faptul că minorii principali de ordinul doi, care, pentru cristalele sistemului cubic au forma

$$\begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{12} & s_{11} \end{vmatrix} > 0,$$

sînt pozitivi, duce la inegalitatea

$$s_{11}^2 > s_{12}^2;$$

pe care, ţinînd cont de (63.20), o putem scrie sub forma

$$-s_{11} < s_{12} < s_{11}. \tag{63.21}$$

Condiţia pentru ca minorul principal de ordinul trei, pentru cristalele sistemului cubic, să fie pozitiv

$$\begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{12} \\ s_{12} & s_{11} & s_{12} \\ s_{12} & s_{12} & s_{11} \end{vmatrix} > 0,$$

sau, ceea ce este acelaşi lucru,

$$s_{11}^2 + 2s_{12}^2 - 3s_{11}s_{12}^2 > 0,$$

după descompunerea în factori a părţii stîngi, relaţia capătă forma

$$(s_{11} - s_{12})^2 (s_{11} + 2s_{12}) > 0.$$

De unde rezultă că

$$s_{11} + 2s_{12} > 0$$

sau

$$s_{12} > -s_{11}/2,$$

ceea ce permite o precizare esențială a inegalității (63.21)

$$-\frac{1}{2}s_{11} < s_{12} < s_{11}. \qquad (63.22)$$

Pentru descrierea proprietăților elastice ale corpurilor izotrope se folosește, de obicei, modulul Young, $E = 1/s_{11}$, și coeficientul Poisson, $\nu = -s_{12}/s_{11}$. Din (63.22) rezultă inegalitatea cunoscută pentru coeficientul Poisson al corpurilor izotrope

$$-1 < \nu < \frac{1}{2}. \qquad (63.23)$$

Inegalitățile care rezultă din faptul că minorii de ordinul doi și de ordine mai mari sînt pozitivi, pot fi scrise, de asemenea, într-o formă invariantă. De exemplu, din inegalitatea

$$4\pi\, d_{11}^2 < \varkappa_{11}s_{11}$$

rezultă că în cazul în care vectorul unitar $\boldsymbol{q}$ este arbitrar

$$4\pi(\boldsymbol{q}\cdot \mathrm{d} : \boldsymbol{qq})^2 < (\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{q})(\boldsymbol{qq} : \mathrm{s} : \boldsymbol{qq})\,; \qquad (63.24)$$

inegalitate care arată că coeficientul cuplajului electromecanic pentru efectul piezoelectric longitudinal după orice direcție este mai mic ca unitatea. Este ușor de demonstrat că toți coeficienții posibili ai cuplajului electromecanic pentru orice orientare arbitrară a cîmpului electric și tensiunilor mecanice sînt, de asemenea, subunitari.

§ 64. SCHIMBAREA SIMETRIEI CRISTALELOR ÎN CAZUL UNOR TRANZIȚII DE FAZĂ DE SPEȚA A DOUA

Sînt cunoscute suficient de multe substanțe chimice, care pot exista în cîteva modificații cristaline; fiecare modificație este stabilă într-un interval termic bine definit. În cazul variației temperaturii, aceste substanțe suferă tranziții de fază. În majoritatea cazurilor, acestea sînt *tranziții de speța întîi*, în care se produce variația în salturi a structurii cristaline, această variație corespunzînd, la rîndul ei, unei variații în salturi a stării substanței.

Însă tranzițiile de fază dintre două stări alotropice cristaline diferite (adică avînd simetrii diferite) ale unei aceleiași substanțe

se pot produce și altfel. Este vorba despre faptul că pentru un singur caz particular de modificare a simetriei, și anume, pentru micșorarea acesteia, este suficientă o deplasare oricît de mică a particulelor din punctele poziției particulare în care se aflau inițial.

Așadar, o deplasare oricît de mică a particulelor, care se află în centrele de simetrie ale unei structuri cristaline, determină pierderea de către structură a centrelor de simetrie. Dacă particulele care se află pe axele de simetrie sau în planurile de simetrie se deplasează de pe aceste axe sau planuri, structura își pierde aceste elemente de simetrie; ea le păstrează numai în cazul în care deplasările particulelor se produc în planul de simetrie sau de-a lungul axei de simetrie.

Astfel de tranziții de fază, în care modificarea simetriei cristalului se produce ca urmare a unei variații infinit mici a structurii lui, ceea ce face ca starea corpului să se modifice continuu, nu în salturi, se numesc *tranziții de fază de speța a doua.*

În realitate, firește, niciodată nu putem fi siguri că deplasarea atomilor care provoacă micșorarea gradului de simetrie este infinit mică; se poate afirma numai că aceasta este într-atît de mică încît precizia aparatelor pe care le avem este insuficientă pentru a sesiza saltul. Cu toate acestea, chiar dacă uneori sesizăm într-o anumită stare un salt, constatăm însă că el este mic; în aceste cazuri se spune că tranziția de fază, chiar dacă este de speța întîi, este apropiată de o tranziție de fază de speța a doua. Astfel este, de exemplu, tranziția de fază din titanatul de bariu. Să o examinăm mai amănunțit.

În figura 64.1 este reprezentată structura unei modificații cubice a titanatului de bariu, $BaTiO_3$. Grupul ei spațial este $Pm3m$, iar cel punctual, $m3m$. Această modificație există la o temperatură mai mare de 120 °C. La o temperatură mai mică de 120 °C, atomii de titan și de oxigen încep să se deplaseze față de atomii de bariu în direcția uneia dintre muchiile cubului.

Este complet evident că deîndată ce începe această deplasare, simetria cristalului scade dintr-o dată: a grupului spațial pînă la $P4mm$, iar a grupului punctual pînă la $4mm$. Așadar, la această temperatură se produce trecerea titanatului de bariu în modifi-

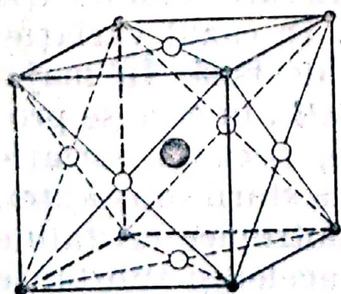


Fig. 64.1. Structura modificației cubice a titanatului de bariu.

cația tetragonală. La temperaturi apropiate de temperatura tranziției de fază, abaterea structurii de la structura cubică este foarte mică. Dacă temperatura scade în continuare, abaterea de la structura cubică se mărește treptat, dar chiar și la temperatura camerei, adică la o temperatură cu 100° C mai mică decît temperatura tranziției, deplasările maxime ale atomilor de la poziția lor „cubică" nu depășesc 0,03 din parametrul celulei, iar raportul dintre axe, c/a, diferă de unitate cu și mai puțin.

În titanatul de bariu micșorarea simetriei este determinată de deplasarea atomilor; de aceea, asemenea tranziții se mai numesc *tranziții* de tip *deplasare.* Exact același mecanism al micșorării simetriei acționează și în tranzițiile de fază de speța a doua de tipul „ordine-dezordine". Să le investigăm, luînd ca exemplu tranziția de speța a doua din aliajul CuZn.

La temperaturi suficient de înalte, acest aliaj (fig. 64.2) reprezintă o structură cubică centrată intern (structură de tip α—Fe): atomii de cupru și de zinc ocupă, cu exact aceeași probabilitate, nodurile unei rețele cubice Bravais centrată intern; grupul spațial al acestei structuri este $Im3m$. La o anumită scădere a temperaturii devine însă mai stabilă din punct de vedere termodinamic acea distribuție a atomilor care, în prima sferă de coordonare a unui atom dat, este mai probabil să întîlnească un atom de cealaltă specie, decît un atom de același fel. Tocmai în acest moment simetria cristalului se modifică, cu toate că schimbarea aranjării relative a atomilor este extrem de neînsemnată. Tendința fiecărui atom de a se înconjura cu vecini, cei mai apropiați, cu precădere din cealaltă specie, face ca, dacă ne-am imagina o bucată nu prea mare (totuși macroscopică) din structura cristalină desfășurată în cele două rețele cubice simple implantate una în alta, în nodurile uneia dintre subrețele să se afle cu precădere atomii de o anumită specie, iar în nodurile celei de a doua subrețele, atomii de celălalt fel. Aceasta înseamnă însă că subrețelele sînt neechivalente din punct de vedere al simetriei: structura și-a pierdut translațiile, care uneau vîrfurile cuburilor cu centrele lor. Așadar, în urma unei variații complet neglijabile a distribuției atomilor, simetria de translație s-a redus

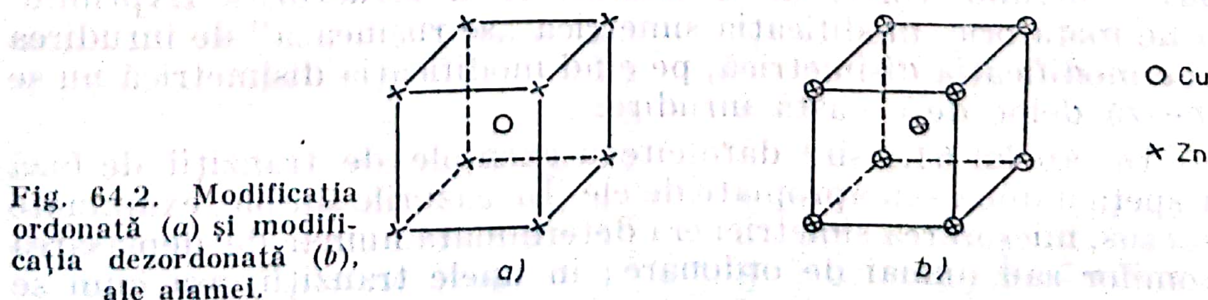


Fig. 64.2. Modificația ordonată (*a*) și modificația dezordonată (*b*), ale alamei.

la jumătate; rețeaua Bravais a noii structuri, parțial ordonate, este cubică primitivă, grupul spațial fiind *Pm3m*.

Subliniem faptul că chiar o deosebire total neînsemnată a probabilităților de a se găsi în nodurile subrețelei date atomi de specii diferite, este suficientă pentru micșorarea menționată a simetriei. La o scădere în continuare a temperaturii, aceste probabilități se diferențiază tot mai mult, ordonarea cristalului crește și ea, apropiindu-se de o ordonare perfectă, cînd o subrețea este populată cu atomi de o anumită specie, iar cealaltă numai cu atomi de cealaltă specie. De data aceasta însă simetria cristalului nu se mai schimbă: atît în cazul unui cristal complet ordonat, cît și a unuia cu o ordonare incipientă, grupul spațial este același, *Pm3m*, și numai în cazul unui cristal complet dezordonat ea este mai înaltă, și anume, *Im3m*.

Exemplele analizate arată cum, pentru o variație oricît de mică a structurii, se modifică simetria în salt. Pe lîngă aceasta, aceste exemple ne ajută să înțelegem că modificațiile legate între ele prin tranziții de fază de speța a doua nu sînt egale între ele: una dintre ele are simetrie superioară față de cealaltă. Vom numi prima modificație modificație *simetrică*, iar pe cea de-a doua *disimetrică*.

Prin urmare, grupul spațial al modificației disimetrice este un subgrup al grupului spațial al modificației simetrice. În afară de această condiție, grupurile spațiale ale modificațiilor cristaline, legate printr-o tranziție de fază de speța a doua, trebuie să mai satisfacă și alte cîteva condiții (v. § 66).

Inegalitatea dintre modificarea simetrică și cea disimetrică apare deosebit de pregnant în faptul că structura modificației disimetrice, pe măsura apropierii temperaturii de punctul tranziției de fază, T_c, se apropie tot mai mult de structura modificației simetrice, iar odată cu îndepărtarea de T_c, se abate tot mai mult de la modificația simetrică; dimpotrivă, în structura modificației simetrice situația este inversă: pînă la punctul de tranziție nu se produce nici o schimbare care s-o apropie de structura modificației disimetrice (subliniem faptul că este vorba numai despre structură: în faza simetrică, pe măsura apropierii de punctul Curie, apar indicii care pun în evidență aceasta — v. Brout, 1967 — nefiind vorba de o modificare a structurii). Exprimîndu-ne metaforic, modificația simetrică „se rușinează" de înrudirea ei cu modificația disimetrică, pe cînd modificația disimetrică nu se jenează deloc de această înrudire.

În tabelul 64.1 sînt date cîteva exemple de tranziții de fază de speța a doua sau apropiate de ele. În cazurile simple, examinate mai sus, micșorarea simetriei era determinată numai de deplasarea atomilor sau numai de ordonare; în unele tranziții, așa cum se

Tabelul 64.1

Unele tranziții de fază de speța a doua și unele tranziții apropiate de ele

Substanța		Temperatura de tranziție, °C	Modificația simetrică		Modificația disimetrică		Micșorarea simetriei			Caracterul tranziției
denumirea	formula		grupul spațial	clasa	grupul spațial	clasa	de rotație	de translație	totală	
Titanat de bariu	$BaTiO_3$	120	$Pm3m$	$m3m$	$P4mm$	$4mm$	6	1	6	depl, sg, sI
Sare Seignette	$NaKC_4H_4O_6 \cdot 4H_2O$	24, −18	$P\,2_12_12$	222	$P2_1$	2	2	1	2	or + depl, sg
Sulfat triglicinic	$(CH_2NH_2COOH)_3 \cdot H_2SO_4$	49	$P2_1/m$	$2/m$	$P2_1$	2	2	1	2	or + depl, sg
Dihidrofosfat de potasiu (KDP)	KH_2PO_4	−151	$I\bar{4}2d$	$\bar{4}2m$	$Fdd2$	$mm2$	2	1	2	or + depl, sg
Hexaferocianură de potasiu trihidrată	$K_4Fe(CN)_6 \cdot 3H_2O$	− 25	$C2/c$	$2/m$	Cc	m	2	1	2	or + depl, sg
Sulfat de amoniu	$(NH_4)_2SO_4$	− 49	$Pnam$	mmm	$Pna2_1$	$mm2$	2	1	2	sg, sI
Propionat de calciu și stronțiu	$CaSr(CH_3CH_2COO)_6$	8,5	$\{P4_32_12;\ P4_12_12\}$	422	$\{P4_3;\ P4_1\}$	4	2	1	2	sg
Dihidrofosfat de amoniu (ADP)	$NH_4H_2PO_4$	−125	$I\bar{4}2d$	$\bar{4}2m$	$P2_12_12_1$	222	2	2	4	or + depl
Trioxid de wolfram	WO_3	900	$Pm3m$	$m3m$	$P4/nmm$	$4/mmm$	3	2	6	depl
Cuarț	SiO_2	573	$\{P6_222;\ P6_422\}$	622	$\{P3_121;\ P3_221\}$	32	2	1	2	depl
Salpetru de sodiu	$NaNO_3$	275,5	$R\bar{3}m$	$\bar{3}m$	$R\bar{3}c$	$\bar{3}m$	1	2	2	or
Alamă	CuZn	450	$Im3m$	$m3m$	$Pm3m$	$m3m$	1	2	2	or
Aliaj Heussler	Cu_2MnAl		$Im3m$	$m3m$	$Fm3m$	$m3m$	1	4	4	or

Prescurtările: depl — tranziție care este însoțită de deplasarea atomilor; or — tranziție legată de ordonare; sg — tranziție seignettoelectrică; sI — tranziție de specia întîi.

vede din tabel, acţionează concomitent ambele mecanisme (se obişnueşte să se considere că factorul iniţiator în asemenea tranziţii îl constituie ordonarea, deplasarea atomilor fiind doar o consecinţă a ordonării).

În coloana care conţine micşorarea simetriei de rotaţie este trecut numărul care arată de cîte ori se micşorează această simetrie printr-o tranziţie, mai precis, subgrupul fiecărui indice constituie grupul punctual al fazei mai puţin simetrice în raport cu grupul punctual al fazei mai simetrice. În coloana următoare se indică de cîte ori se micşorează simetria de translaţie în timpul tranziţiei, adică de cîte ori creşte volumul celulei elementare (mai exact, numărul de atomi din ea). În fine, numărul din a treia coloană, egal cu produsul dintre numerele din prima şi din cea de a doua coloană, desemnează un subgrup al cărui indice îl reprezintă grupul spaţial al modificaţiei disimetrice în raport cu grupul spaţial al modificaţiei simetrice. În tabel sînt date exemple de tranziţii pentru care variază numai simetria de rotaţie (cuarţ, titanat de bariu, sare Seignette, sulfat triglicinic, dihidrofosfat de potasiu), sau numai simetria de translaţie (aliajele care se ordonează, salpetru de sodiu) şi, în sfîrşit, exemple de tranziţii pentru care variază şi simetria de rotaţie şi cea de translaţie (dihidrofosfat de amoniu, trioxid de wolfram).

Foarte răspîndit şi totodată important din punct de vedere practic, tipul de tranziţii de fază de speţa a doua constituie tranziţiile care se produc fără variaţia simetriei de translaţie (Indenbom, 1960). În figura 64.3 sînt reprezentate toate variantele

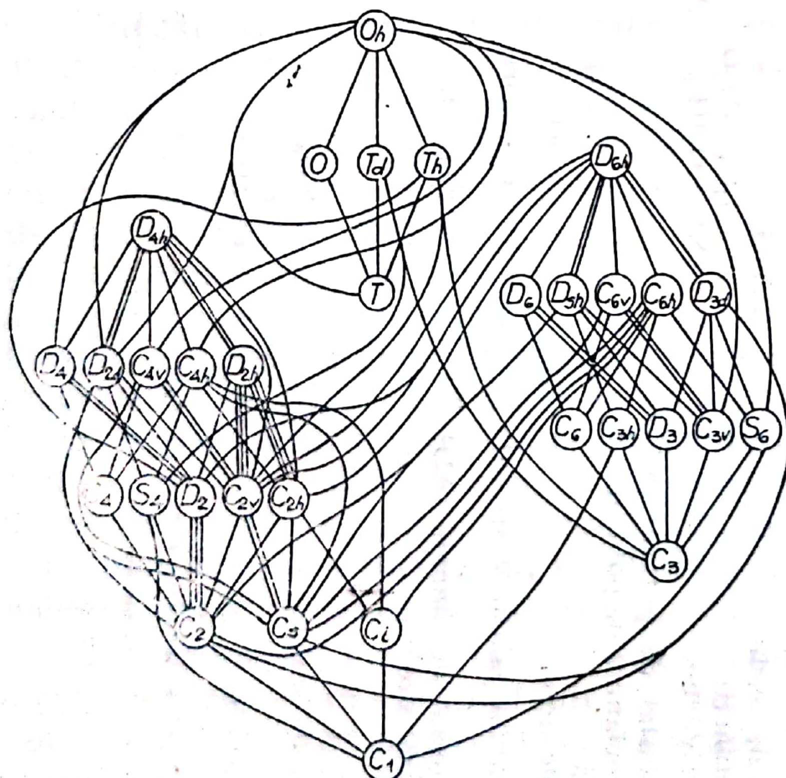


Fig. 64.3. Modificarea simetriei cristalelor în cazul transformărilor de fază de speţa a doua, care se produc fără schimbarea numărului de atomi din celula elementară. Liniile unesc clasele cristalografice între care este posibilă transformarea. Dreptele indică faptul că simetria se modifică în transformare de două ori, liniile curbe, mai mult de două ori, liniile duble şi cele triple, că transformarea se poate realiza în două sau trei moduri (Indenbom, 1960).

posibile de schimbare a simetriei pentru tranziţiile de acest tip. În total există 90 variante de acest fel; pentru 58 dintre ele este caracteristică micşorarea ordinului grupului punctual de două ori, pentru 9 — de patru ori, pentru 19 — de şase ori şi pentru 4 variante — de opt ori.

În majoritatea cazurilor, la temperaturi coborîte corespund modificaţii ordonate, mai puţin simetrice, la temperaturi ridicate — modificaţii mai simetrice, dezordonate; această regulă empirică nu este însă îndeplinită totdeauna. De exemplu, modificaţia disimetrică a sării Seignette trece în modificaţia simetrică, nu numai prin creşterea temperaturii la 24 °C, ci şi prin scăderea acesteia la −18 °C.

Dacă grupul spaţial al modificaţiei disimetrice este un subgrup de indice n în raport cu grupul modificaţiei simetrice, atunci modificaţia mai simetrică poate trece în cea mai puţin simetrică prin n moduri. În cazul unor astfel de tranziţii, cristalul se separă, de regulă, în porţiuni care se numesc *domenii*, în fiecare dintre acestea tranziţia realizîndu-se într-un anumit mod; în total iau naştere n tipuri de domenii. Operaţiile de simetrie care intră într-un grup spaţial al modificaţiei disimetrice transformă fiecare domeniu în el însuşi. Operaţiile de simetrie care intră însă în grupul spaţial al modificaţiei simetrice, dar care nu fac parte din grupul spaţial al modificaţiei disimetrice, cu alte cuvinte, operaţiile de simetrie pe care cristalul le pierde prin translaţie, transformă un domeniu de un anumit tip într-un domeniu de alt tip.

Dacă în cadrul tranziţiei simetria de translaţie a cristalului se conservă, atunci un domeniu de un anumit tip se transformă într-un domeniu de alt tip prin cîteva rotaţii simple, sau rotaţii cu inversie, şi anume prin acelea care s-au pierdut prin tranziţie. Dacă însă în cadrul tranziţiei variază numai simetria de translaţie, nu şi cea de rotaţie, atunci domeniile de diferite tipuri se transformă unul într-altul nu prin rotaţii, ci tot prin acele translaţii care au fost pierdute în cadrul tranziţiei. Se poate spune că în primul caz domeniile de un anumit tip sînt răsucite faţă de domeniile celuilalt tip, iar în al doilea caz sînt deplasate faţă de ele. Aceste cazuri sînt ilustrate în figura 64.4.

Tranziţiile de fază de speţa a doua, în cadrul cărora simetria cristalului se micşorează, contravin, la prima vedere, principiului Curie. Acest principiu afirmă că atunci „cînd în anumite fenomene se constată apariţia unor anumite disimetrii, aceleaşi disimetrii trebuie să fi fost şi în cauzele care le-au generat" (P. Curie, 1966, p. 102); în acest caz însă micşorarea simetriei cristalului se produce datorită variaţiei temperaturii, cauză evident, care nu prezintă deloc disimetria cerută. Rezolvarea acestui paradox constă în faptul că în medie simetria cristalului nu se micşorează nicidecum în cadrul acestei tranziţii. Într-un volum care conţine suficient de multe domenii sînt reprezentate totodată în proporţie aproximativ egală toate modurile posibile de tranziţie, adică toate tipurile posibile de domenii; deci simetria sa va

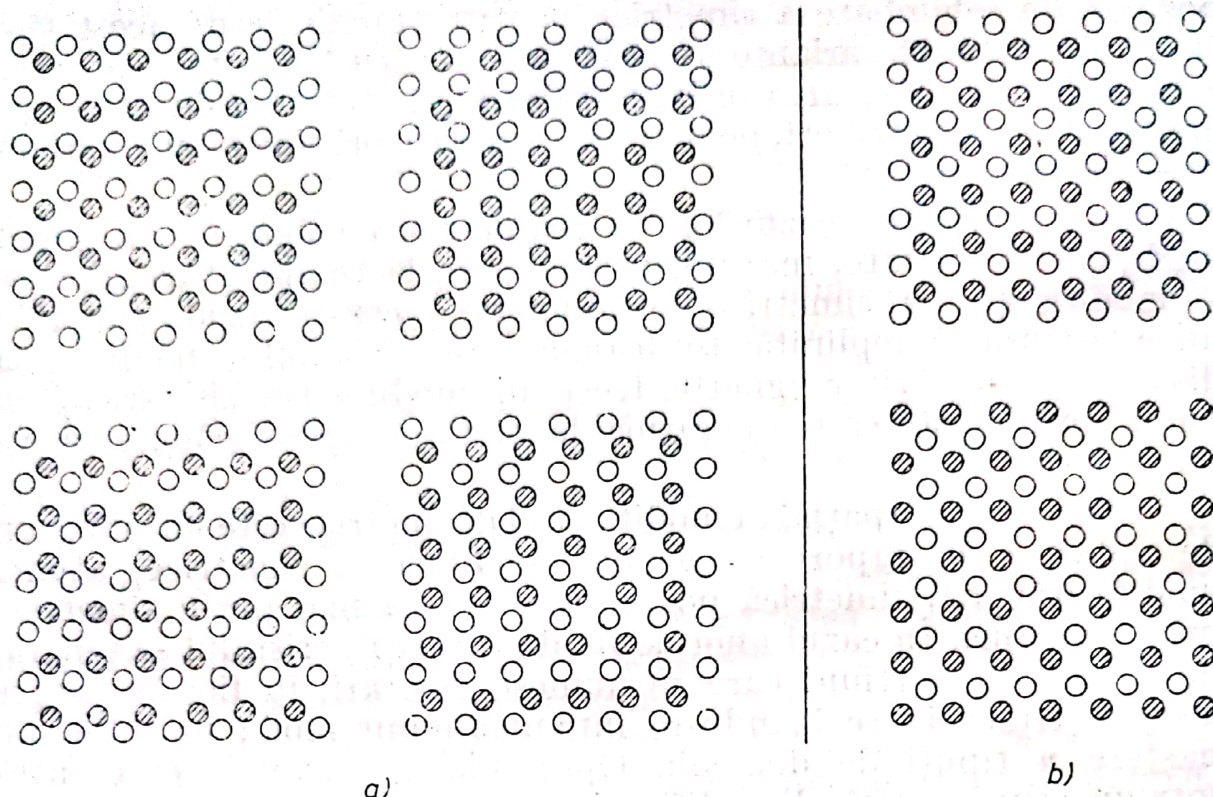


Fig. 64.4. Schema împărțirii unui cristal în domenii în cazul unei transformări de fază de speța a doua : *a*) analogul bidimensional al transformării din titanatul de bariu — patru tipuri de domenii care se transformă unul în altul prin rotația cu 90° (în realitate în acest caz se transformă șase tipuri de domenii) ; *b*) analogul bidimensional al transformării din aliajul CuZn — două tipuri de domenii, care se transformă unul în altul la translațiile suferite la transformare (într-o transformare reală se formează două tipuri de domenii).

fi după tranziție aceeași ca și înainte de tranziție (din această cauză vorbind despre simetria unei modificații disimetrice, ne referim totdeauna nu la simetria unui polidomeniu al acestei modificații, ci la simetria unui singur domeniu al cristalului. Se poate întîmpla că datorită tranziției să se obțină cristale monodomeniale. Analizînd o cantitate suficient de mare de cristale care au suferit tranziția ne vom convinge că simetria mulțimii lor, ca un întreg, așa cum și era de așteptat, nu a scăzut datorită variației temperaturii.

Exemplul tranzițiilor de fază ale modificațiilor cristaline mai simetrice în altele mai puțin simetrice demonstrează că există cazuri în care principiul Curie nu este aplicabil direct unui obiect luat separat, însă obiectul dat poate fi considerat drept un element al unui anumit ansamblu statistic, pentru care principiul Curie este perfect satisfăcut.

Principiul Curie, care interzice unele fenomene, nici pe departe nu impune ca fenomenele permise de el să se producă într-adevăr; astfel, el interzice ca în cristalele cu simetrie internă (cu centru de simetrie) să se manifeste proprietăți piezoelectrice, însă din aceasta nu rezultă nicidecum că în cristalele care nu au centru de simetrie asemenea proprietăți trebuie să apară în mod obligatoriu. Aici poate fi ușor sesizată analogia cu principiile termodinamicii, care, de asemenea, interzic unele fenomene, fără a cere însă ca fenomenele permise de ele să se producă neapărat în realitate. Analogia dintre principiul Curie și principiile termodinamicii nu se limitează numai la cele de mai sus; din exemplele de tranziții de fază de speța a doua, vedem că principiul Curie, ca și principiul al doilea al termodinamicii, are un carac-

ter statistic. Însă trăsătura principală, care leagă principiul Curie de principiile termodinamicii, este generalitatea sa maximă; ca şi principiile termodinamicii, principiul Curie nu reprezintă de fapt o lege fizică, ci una dintre cele mai generale legi ale naturii. Tocmai de aceea Marie Curie, în concluziile la sinteza lucrărilor lui Pierre Curie din domeniul teoriei simetriei şi al fizicii cristalelor, vorbeşte despre „deosebita valoare filozofică a noţiunilor de simetrie, care pătrund în esenţa tuturor fenomenelor naturii ...'' (M. Curie, 1968, p. 25).

§ 65. MODIFICAREA PROPRIETĂŢILOR FIZICE ALE CRISTALELOR ÎN URMA TRANZIŢIILOR DE FAZĂ DE SPEŢA A DOUA

Pentru descrierea unui cristal care suferă o tranziţie de fază de speţa a doua, L. D. Landau (1937) (v. Landau şi Lifşiţ, 1964, p. 506) a introdus mărimea η, care defineşte gradul de abatere al distribuţiei atomilor dintr-o fază disimetrică faţă de distribuţia lor în fază simetrică; fazei simetrice îi corespunde $\eta = 0$, iar în fază disimetrică η are valori diferite de zero, pozitive sau negative. Vom numi această mărime *parametru de disimetrie*. Deoarece structura unui cristal la o tranziţie de speţa a doua variază continuu, parametrul de disimetrie are, în apropierea punctului de tranziţie valori cît de mici vrem. În cazul tranziţiilor legate de deplasarea atomilor, η poate fi interpretat drept mărime a deplasării. Astfel, în cazul tranziţiei din titanatul de bariu, este natural ca parametrul de disimetrie să fie luat egal cu raportul dintre deplasarea unui atom de titan, u_{Ti} din centrul prismei tetragonale regulate, formată de atomii de bariu cei mai apropiaţi, şi muchia a a celulei elementare a modificaţiei cubice: $\eta = u_{Ti}/a$.

În cazul tranziţiilor legate de ordonare, parametrul de disimetrie poate fi considerat egal cu gradul de ordonare, adică cu mărimea care arată de cîte ori este mai mare probabilitatea ca un atom de o anumită specie să se afle în subreţeaua dată, decît probabilitatea pentru un atom de cealaltă specie. Dacă de pildă în cazul tranziţiei de speţa a doua, examinată mai sus, în cazul alamei, probabilităţile respective le notăm cu w_{Cu} şi w_{Zn}, atunci

$$\eta = (w_{Cu} - w_{Zn})/(w_{Cu} + w_{Zn}).$$

În acest paragraf ne vom limita la studiul tranziţiilor de fază de speţa a doua, care se produc cu reducerea simetriei la jumătate. În acest caz se formează totdeauna două tipuri de domenii: unuia dintre ele îi corespund valori pozitive ale parametrului de disimetrie, iar celuilalt valori negative. Evident, parametrul de disimetrie este invariant faţă de toate acele operaţii de simetrie

care transformă fiecare tip de domeniu în sine însuşi, adică faţă de grupul spaţial al fazei disimetrice. Acele operaţii ale grupului spaţial al fazei simetrice, care nu sînt cuprinse în grupul spaţial al fazei disimetrice, transformă, după cum s-a remarcat, domeniile de un tip în domenii de celălalt tip; deoarece în domenii de tipuri diferite parametrul de disimetrie are semne contrare, ca urmare a acestor operaţii el se înmulţeşte cu -1.

Evident, toate funcţiile pare posibile ale parametrului de disimetrie, în particular, gradele lui pare, vor fi invarianţi ai grupului spaţial al fazei simetrice. Produsele dintre funcţiile pare ale parametrului de disimetrie şi expresiile invariante faţă de grupul spaţial al fazei simetrice, expresii formate din componentele forţelor termodinamice, sînt, de asemenea, invariante faţă de acest grup. Reamintim că tocmai din invarianţa forţelor şi coordonatelor termodinamice faţă de translaţiile formate din componentele lor, rezultă că expresiile sînt invariante faţă de grupul spaţial al cristalului, atunci şi numai atunci cînd ele sînt invariante faţă de grupul punctual al acestuia (v. §§ 25 şi 44).

Există însă şi un alt tip de invarianţi: produsele dintre parametrul de disimetrie (sau funcţii ale lui impare, în particular, gradele impare) şi acele expresii formate din componente ale forţelor sau coordonatelor termodinamice, care se transformă la fel ca parametrul de disimetrie. Fie $K_a X_a$ şi $L_{ab} X_a X_b$ tocmai astfel de funcţii în raport cu forţele generalizate*: ele sînt invariante la operaţiile care se conservă în cadrul tranziţiei în faza disimetrică, iar prin aplicarea operaţiilor care se pierd prin această tranziţie se înmulţesc cu -1. Coeficienţii K_a şi L_{ab} trebuie comparaţi cu elementele matricei M a potenţialului termodinamic (v. §§ 57, 58, 60): coeficienţii L_{ab} corespund elementelor M_{ab} cu aceiaşi indici, iar K_a elementelor M_{0a} şi M_{a0}. Vom considera că sînt supuse la transformare nu forţele termodinamice X_a, ci coeficienţii K_a şi L_{ab}; atunci problema se reduce la găsirea elementelor matricei M, invariante faţă de grupul punctual al fazei disimetrice, G_D, iar prin aplicarea celorlalte operaţii ale grupului punctual al fazei simetrice G, îşi schimbă semnul în semnul opus. Folosind faptul că în acest caz simetria se reduce la jumătate, nu este greu de arătat că din componentele tensorilor, invariante faţă de grupul G_D (dealtfel, ca şi din coeficienţii K_a şi L_{ab}) se pot compune asemenea combinaţii liniare care, fie că sînt invariante faţă de toate operaţiile grupului G, fie că sînt invariante numai faţă

---

* Aici, ca şi în paragrafele precedente, X sînt forţele termodinamice generalizate, însă spre deosebire de indicii A, B, C, D, care pot lua zece valori: $A, B, C, D = 0, 1, \ldots, 9$, indicii introduşi, a, b, c, d, iau numai nouă valori: $a, b, c, d = 1, \ldots, 9$.

de G_D, iar prin aplicarea operaţiilor din $G-G_D$, îşi schimbă semnul în semnul opus (prin simbolurile $G-G_D$ s-a notat mulţimea elementelor grupului G, care nu fac parte din subgrupul lui, G_D ; subliniem că $G - G_D$ nu este un grup). În acest caz, numărul total de combinaţii liniare independente ale ambelor tipuri este egal cu numărul de componente independente care corespund tensorului invariant faţă de grupul G_D. Prin urmare, dacă se compară forma generală a tensorilor invarianţi faţă de grupul G şi faţă de subgrupul său, G_D , atunci se constată că acele componente (sau combinaţii liniare ale lor), care sînt invariante faţă de G_D şi se înmulţesc totodată cu -1, prin aplicarea operaţiilor $G - G_D$, completează forma generală a tensorului invariant faţă de G_D. Evident, şi coeficienţii K_a şi L_{ab} completează forma generală a matricei M, invariantă faţă de G, pînă la forma generală a matricei, invariantă faţă de G_D (v. tab. 58.5). Formulele simbolice

$$K_a(G/G_D) = M_{0a}(G_D) - M_{0a}(G),$$

$$L_{ab}(G/G_D) = L_{ab}(G_D) - L_{ab}(G)$$

descriu metoda grafică de determinare a coeficienţilor K_a şi L_{ab} pentru tranziţia de fază de speţa a doua dintre grupurile G şi G_D, care se bazează pe acest rezultat ; din schema matricei M a fazei disimetrice „se scade" schema matricei fazei simetrice : „diferenţa" este tocmai schema coeficienţilor K şi L (fig. 65.1).

Trebuie însă să ţinem cont de faptul că schema matricei fazei disimetrice poate fi diferită de o schemă standard. Este vorba de faptul că sistemul de coordonate în care este descrisă faza disimetrică este predeterminat prin alegerea sistemului de coordonate pentru faza simetrică. Astfel, dacă faza simetrică este descrisă într-un sistem de coordonate cristalofizic, aşa cum se obişnuieşte, nu este exclus ca sistemul de coordonate pentru faza disimetrică să nu mai fie un sistem cristalofizic. Exact aşa se şi

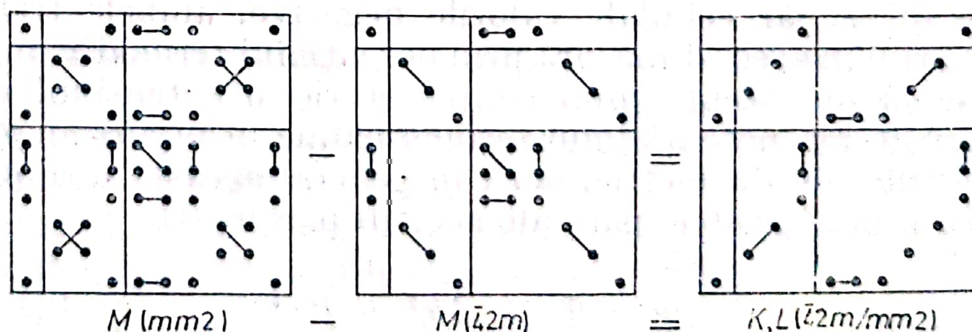


Fig. 65.1. Determinarea grafică a coeficienţilor K_a şi L_{ab} pentru transformarea de fază de speţa a doua într-un cristal de dihidrofosfat de potasiu, $G = \overline{4}2\,m$, $G_D = mm2$.

constată în cadrul tranziţiilor din sarea Seignette şi din dihidrofosfatul de potasiu. În primul caz, deosebirea faţă de un sistem de coordonate cristalofizic se reduce la schimbarea denumirii axelor ($G_D = 2 \| X_1$) şi, respectiv, la permutarea unor coloane şi linii în matricea $M(G_D)$, care, datorită acestui fapt, poate fi obţinută fără nici o dificultate din matricea standard. În al doilea caz sistemul este rotit cu 45° faţă de sistemul cristalofizic ($G_D = mm2$, $2 \| X_3$, $m \perp (e_1 \pm e_2)/\sqrt{2}$) ceea ce face ca schema matricei $M(G_D)$ să se deosebească substanţial faţă de cea standard; ea este dată în figura 65.1, iar relaţiile care o leagă de cea standard (tab. 58.5) sînt cuprinse în § 85.

Vom considera potenţialul termodinamic al cristalului pentru un parametru al disimetriei, η, funcţie de forţele termodinamice $\Theta = T - T_c$, E_i, σ_λ şi de acest parametru

$$\Phi = \Phi(\Theta,\ \boldsymbol{E},\ \boldsymbol{\sigma};\ \eta).$$

Aici sînt însă numai 10 variabile independente, nu 11: în cazul unor forţe termodinamice date, parametrul de disimetrie corespunzător acestor forţe se determină din condiţia de echilibru termodinamic, adică din condiţia ca potenţialul termodinamic să fie minim.

Am putea crede că potenţialul termodinamic pentru $\eta = 0$ este invariant faţă de grupul punctual al modificaţiei simetrice şi că pentru $\eta \neq 0$ este invariant faţă de grupul punctual al modificaţiei disimetrice. Dar nu este aşa. În realitate, potenţialul termodinamic trebuie să rămînă invariant faţă de un grup punctual superior şi pentru $\eta \neq 0$, deoarece el exprimă nu numai un singur mod de micşorare a simetriei, ci pe toate aceste moduri şi, corespunzător, toate tipurile de domenii.

În cazul particular în care simetria se reduce de două ori, dealtfel singurul, cum este studiat aici, se formează două tipuri de domenii. Unuia dintre acestea îi corespund valorile pozitive ale lui η, iar celuilalt valorile negative, ambele trebuind să fie descrise în aceeaşi măsură prin potenţialul termodinamic. Este deci clar că în absenţa unui cîmp electric şi a tensiunilor mecanice, dezvoltarea potenţialului termodinamic în raport cu gradele parametrului de disimetrie, dacă în general aceasta este posibilă, conţine numai gradele pare ale acestui parametru

$$\Phi = \Phi_0 + A\eta^2 + B\eta^4 + \ldots; \tag{65.1}$$

coeficienţii acestei dezvoltări, Φ_0, A şi B sînt funcţii de temperatură (raţionamentul de mai sus este valabil numai în cazul parti-

cular considerat; pentru cazul general, v. Landau și Lifșiț, 1964, cap. XIV).

Punctul tranziției de speța a doua este probabil un punct particular al potențialului termodinamic; din această cauză, faptul că dezvoltarea (65.1) este permisă nu este demonstrat. Într-o serie de cazuri însă concluziile stabilite pe baza acestei dezvoltări concordă satisfăcător cu datele experimentale.

Condițiile de echilibru cer ca potențialul termodinamic să fie minim

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} = 2A\eta + 4B\eta^3 = 0, \qquad (65.2)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \eta^2} = 2A + 12B\eta^2 > 0. \qquad (65.3)$$

Condiția (65.2) este satisfăcută de trei valori ale parametrului de disimetrie: $\eta = 0$ și

$$\eta = \pm\sqrt{-A/(2B)}. \qquad (65.4)$$

Soluția $\eta = 0$ corespunde modificației simetrice. Din condiția (65.3) rezultă că pentru această modificație $A > 0$.

Soluția (65.4), din contră, corespunde modificației disimetrice a ambelor tipuri de domenii ale ei. Din forma ei este clar că în această modificație coeficienții A și B sînt de semne diferite, iar din condiția (65.3) rezultă că în această modificație $A < 0$; prin urmare, $B > 0$.

Așadar, în punctul de tranziție, coeficientul A își modifică semnul. În prima aproximație,

$$A = a(T - T_c), \qquad (65.5)$$

în care T_c este punctul tranziției de fază de speța a doua, care se mai numește și punct Curie. Dacă unei temperaturi mai mari îi corespunde o modificație simetrică, coeficientul a va fi pozitiv, iar în caz contrar — negativ.

În punctul Curie, $\partial^2\Phi/\partial\eta^2 = 0$. Pentru ca și în acest punct potențialul termodinamic să aibă un minim, trebuie să fie îndeplinite condițiile

$$\frac{\partial^3 \Phi}{\partial \eta^3} = 0, \qquad \frac{\partial^4 \Phi}{\partial \eta^4} = 0.$$

De unde rezultă că și în punctul Curie $B > 0$. Datorită continuității, acest coeficient este pozitiv într-un anumit interval de temperatură din jurul punctului de tranziție precum și în modificația simetrică. Într-o primă aproximație îl vom considera pur și simplu o constantă pozitivă.

Prin urmare, în modificația disimetrică avem

$$\eta = \pm \sqrt{\frac{a(T_c - T)}{2B}}, \tag{65.6}$$

în care a și B nu depind, în primă aproximație, de temperatură. Această formulă exprimă dependența de temperatură a parametrului de disimetrie,

$$\eta \sim |T - T_c|^{1/2},$$

caracteristică pentru tranzițiile de speța a doua.

Prin urmare, dezvoltarea (65.1) a căpătat forma

$$\Phi = \Phi_0(T) + a\Theta\eta^2 + B\eta^4 + \ldots, \tag{65.7}$$

în care $\Theta = T - T_c$. Dacă cristalul este plasat în cîmp electric sau este supus acțiunii tensiunilor mecanice, această dezvoltare trebuie completată cu termenii care să depindă de componentele vectorului intensitate a cîmpului electric, $E_i = X_i$ și ale tensorului tensiunilor, $\sigma_\lambda = X_{3+\lambda}$ și care să fie invarianți față de grupul punctual al modificației simetrice. Asemenea termeni pot fi subîmpărțiți în trei tipuri.

1. Invarianți, formați din componentele Θ și X_b ale forțelor termodinamice generalizate. În ansamblu ei formează sume de forma $R_b^{(0)}\Theta X_b$ și $M_{bd}^{(0)}X_bX_d$. Aici, $R_b^{(0)}$ și $M_{bd}^{(0)}$ au aceeași formă și satisfac aceleași relații ca și elementele matricei termodinamice $M_{BD}(B, D=0, 1, \ldots, 9)$ a clasei cristalografice considerate (v. tab. 58.5), în timp ce $R_b^{(0)}$ corespund elementelor M_{0B} și M_{b0}, iar $M_{bd}^{(0)}$ elementelor M_{bd}.

2. Produse ale invarianților forțelor termodinamice generalizate cu invarianții parametrului de disimetrie. Dintre ele vom analiza numai pe acelea care intră în suma $Q_bX_b\eta^2$. Evident, coeficienții Q_b au aceeași formă și satisfac aceleași relații ca și $R_b^{(0)}$.

3. Invarianți, compuși din produse dintre parametrul de disimetrie și forțele termodinamice generalizate, împreună cu combinațiile lor pătratice. În ansamblu, ele reprezintă sume de forma $K_bX_b\eta$ și $L_{bd}X_bX_d\eta$, examinate amănunțit mai sus. La același tip de invarianți se referă și sumele de forma $H_b\Theta X_b\eta$, însă

pe ele nu le vom studia, deoarece la temperaturile apropiate de punctul Curie, ele reprezintă doar mici adaosuri la sumele $K_b X_b \eta$.

Așadar, ajungem la următoarea dezvoltare a potențialului termodinamic al unui cristal tensionat și supus unui cîmp electric, în vecinătatea punctului Curie

$$\Phi = \Phi_0(T) - R_b^{(0)} \Theta X_b - \frac{1}{2} M_{bd}^{(0)} X_b X_d + a\,\Theta \eta^2 +$$

$$+ B\eta^4 - K_b X_b \eta - \frac{1}{2} L_{bd} X_b X_d\, \eta - Q_b X_b \eta^2. \qquad (65.8)$$

Parametrul de disimetrie, η, se determină din condiția de echilibru termodinamic

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} = 2a\Theta\eta + 4B\eta^3 - K_b X_b - \frac{1}{2} L_{bd} X_b X_d - 2Q_b X_b \eta = 0. \qquad (65.9)$$

Valoarea acestui parametru, în absența cîmpului electric și a tensiunilor mecanice, este

$$\eta_0 = \begin{cases} 0 & \text{în faza simetrică,} \\ \pm\sqrt{-\dfrac{a\Theta}{2B}} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \qquad (65.10)$$

Diferențiind egalitatea (65.9) în raport cu T și cu X_b, obținem

$$\frac{\partial \eta}{\partial T} = -\frac{2a\eta}{2a\,\Theta + 12\,B\eta^2 - 2Q_b X_b}, \qquad (65.11)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial X_b} = \frac{K_b + L_{bd} X_d + 2Q_b \eta}{2a\Theta + 12\,B\eta^2 - 2Q_b X_b}.$$

Făcînd în aceste formule înlocuirea $\eta = \eta_0$ și punînd $X_b = 0$, găsim valorile derivatelor corespunzătoare pentru cîmpuri elec-

trice şi tensiuni mecanice foarte mici

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial T}\right)_0=\begin{cases}0 & \text{în faza simetrică,}\\[2ex] \dfrac{\eta_0}{2\Theta} & \text{în faza disimetrică;}\end{cases}$$

(65.12)

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial X_b}\right)=\begin{cases}\dfrac{K_b}{2a\Theta} & \text{în faza simetrică,}\\[2ex] -\dfrac{K_b+2Q_b\eta_0}{4a\Theta} & \text{în faza disimetrică.}\end{cases}$$

Să calculăm coordonatele termodinamice generalizate ale unui cristal. Entropia unităţii de volum este

$$S=-\left(\frac{\partial \Phi}{\partial T}\right)_{\text{tot}}=-\frac{\partial \Phi}{\partial T}-\frac{\partial \Phi}{\partial \eta}\frac{\partial \eta}{\partial T}.$$

În virtutea condiţiei de echilibru, (65.3), al doilea termen este egal cu zero, astfel încît

$$S=-\frac{\mathrm{d}\Phi_0}{\mathrm{d}T}+R_b^{(0)}X_b-a\eta^2. \qquad (65.13)$$

Analog găsim celelalte coordonate termodinamice

$$x_b=R_b^{(0)}\Theta+M_{bd}^{(0)}X_d+K_b\eta+L_{bd}X_d\eta+Q_b\eta^2. \qquad (65.14)$$

Acum se poate analiza variaţia proprietăţilor cristalului, adică variaţia coeficienţilor lui termodinamici. Căldura specifică este

$$C_p=T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\text{tot}}=T\frac{\partial S}{\partial T}+T\frac{\partial S}{\partial \eta}\frac{\partial \eta}{\partial T}. \qquad (65.15)$$

Substituind expresia (65.13) în formula (65.15), punînd $X_b=0$ şi utilizînd relaţiile (65.12) şi (65.10), obţinem căldura specifică C_p pentru tensiuni mecanice şi cîmpuri electrice constante şi

egale cu zero

$$C_p = \begin{cases} -T\dfrac{\mathrm{d}^2\Phi_0}{\mathrm{d}T^2} & \text{în faza simetrică,} \\[2ex] -T\dfrac{\mathrm{d}^2\Phi_0}{\mathrm{d}T^2} + \dfrac{a^2T}{2B} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \tag{65.16}$$

Prin urmare, în cadrul trecerii de la modificaţia simetrică la modificaţia disimetrică, căldura specifică se măreşte în salturi, un salt fiind egal cu

$$\Delta C_p = \frac{a^2 T_c}{2B}. \tag{65.17}$$

Această concluzie se bazează pe presupunerea că potenţialul termodinamic nu prezintă singularităţi în punctul Curie. În multe tranziţii de speţa a doua, această concluzie nu concordă, într-o măsură mai mare sau mai mică, cu datele experimentale; gradul acestei neconcordanţe arată cît de importantă este discontinuitatea suferită de potenţialul termodinamic în punctul Curie.

Coeficienţii piroelectrici $p_i = R_i$ şi coeficienţii de dilatare termică, $\alpha_\lambda = R_{3+\lambda}$ se calculează cu oricare dintre următoarele formule

$$\begin{aligned} R_b &= \frac{\partial S}{\partial X_b} + \frac{\partial S}{\partial \eta}\frac{\partial \eta}{\partial X_b}, \\ R_b &= \frac{\partial x_b}{\partial T} + \frac{\partial x_b}{\partial \eta}\frac{\partial \eta}{\partial T}. \end{aligned} \tag{65.18}$$

Valorile acestor coeficienţi în cazul unor cîmpuri electrice şi al unor tensiuni mecanice foarte slabe se calculează prin acelaşi procedeu ca şi la deducerea formulei (65.16); ele sînt egale cu

$$R_b = \begin{cases} R^{b(0)} & \text{în faza simetrică,} \\[2ex] R_b^{(0)} \pm \dfrac{K_b}{2}\sqrt{-\dfrac{a}{2B\Theta}} - \dfrac{aQ_b}{2B} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \tag{65.19}$$

Din proprietățile coeficienților K_b și Q_b rezultă că coeficienții piroelectrici și cei de dilatare termică, care sînt diferiți de zero în faza simetrică, la tranziția în faza disimetrică, suferă un salt egal cu

$$\Delta R_b = - \frac{a\, Q_b}{2B}. \tag{65.20}$$

În ambele tipuri de domenii acești coeficienți sînt aceiași.

Dimpotrivă, acei coeficienți piroelectrici și coeficienți ai dilatării termice (sau combinații ale lor) care sînt diferiți de zero numai în faza disimetrică, au în domenii diferite semne contrare; pe măsura apropierii de punctul Curie (din partea fazei disimetrice) acești coeficienți cresc după legea $|T - T_c|^{-1/2}$

$$R_b = \pm \frac{K_b}{2} \sqrt{- \frac{a}{2B\Theta}}. \tag{65.21}$$

Să examinăm, în sfîrșit, coeficienții permitivității dielectrice,

$$\varkappa_{ik} = 4\pi\, M_{ik} \quad (i, k = 1,\ 2,\ 3),$$

coeficienții deformabilității elastice,

$$s_{\lambda\mu} = M_{3+\lambda, 3+\mu} \quad (\lambda,\ \mu = 1, \ldots, 6)$$

și coeficienții piezoelectrici

$$d_{k\lambda} = M_{k, 3+\lambda}.$$

Toți acești coeficienți pot fi calculați cu oricare dintre următoarele formule

$$M_{bd} = \frac{\partial x_b}{\partial X_d} + \frac{\partial x_b}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial X_d},$$
$$M_{bd} = \frac{\partial x_d}{\partial X_b} + \frac{\partial x_d}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial X_b}. \tag{65.22}$$

În cazul unor cîmpuri electrice şi al unor tensiuni mecanice foarte slabe, ei sînt egali cu

$$
M_{bd} = \begin{cases} M_{bd}^{(0)} + \dfrac{K_b K_d}{2a\Theta} & \text{în faza simetrică,} \\ M_{bd}^{(0)} + \dfrac{Q_b Q_d}{2B} - \dfrac{K_b K_d}{4a\Theta} \mp \dfrac{K_b Q_d + K_d Q_b}{2} \sqrt{-\dfrac{1}{2aB\Theta}} \pm \\ \qquad \pm L_{bd} \sqrt{-\dfrac{a\Theta}{2B}} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \tag{65.23}
$$

Pentru analiza acestei expresii remarcăm mai întîi că termenii cu radicali intră numai în acei coeficienţi M_{bd} (sau în combinaţii de ale lor) care sînt diferiţi de zero numai în faza disimetrică, iar termenii fără radicali sînt diferiţi de zero numai în faza simetrică. Totodată, termenii care conţin produsele $K_b K_d$ şi $Q_b Q_d$ fac parte din coeficienţi diferiţi.

Prin urmare, coeficienţii M_{bd} diferiţi de zero atît în faza simetrică cît şi în faza disimetrică sînt aceiaşi în ambele tipuri de domenii. În cazul unor asemenea coeficienţi sînt posibile trei tipuri de comportări.

1. Coeficientul în general nu variază în cadrul tranziţie

$$M_{bd} = M_{bd}^{(0)} \text{ în ambele faze.} \tag{65.24}$$

2. Coeficientul suferă un salt de tranziţie, egal cu

$$\Delta M_{bd} = \frac{Q_b Q_d}{2B}\ ; \tag{65.25}$$

în acest caz saltul coeficienţilor diagonali (cum sînt $\varkappa_{11}$, s_{11} şi s_{44}) este pozitiv, adică în faza disimetrică coeficientul permitivităţii dielectrice sau al deformabilităţii elastice este mai mare decît în faza simetrică.

3. La apropierea de punctul Curie, atît dinspre regiunea fazei de disimetrie cît şi dinspre regiunea fazei de simetrie, coeficientul creşte după legea $|\Theta|^{-1}$. În acest caz, în apropierea punctului

Curie termenii $M_{bd}^{(0)}$ pot fi neglijaţi, astfel încît

$$M_{bd} = \begin{cases} \dfrac{K_b K_d}{2a\Theta} & \text{în faza simetrică,} \\ -\dfrac{K_b K_d}{4a\Theta} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \qquad (65.26)$$

La trecerea prin punctul Curie semnul coeficientului M_{bd} nu se schimbă; în particular, coeficienţii diagonali rămîn pozitivi. Pe lîngă aceasta, este adevărată „legea dublării": pentru distanţe egale de punctul Curie, coeficientul M_{bd} în faza simetrică este de două ori mai mare decît cel din faza disimetrică.

Acei coeficienţi M_{bd}, sau combinaţii ale lor, care sînt diferiţi de zero numai în faza disimetrică, sînt egali în valoare absolută, în domenii de tipuri diferite fiind însă de semne contrare. În cazul unor astfel de coeficienţi sînt posibile două tipuri de comportări.

1. Pe măsura îndepărtării de punctul Curie coeficientul M_{bd} creşte în valoare absolută ca $|\Theta|^{1/2}$; acest tip de comportare apare cînd

$$K_b Q_d + K_d Q_b = 0,$$

însă $L_{bd} \neq 0$. În acest caz,

$$M_{bd} = \begin{cases} 0 & \text{în faza simetrică,} \\ \pm L_{bd}\sqrt{\dfrac{a\Theta}{2B}} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \qquad (65.27)$$

2. Pe măsura apropierii de punctul Curie dinspre partea fazei disimetrice, coeficientul M_{bd} creşte ca $|\Theta|^{-1/2}$

$$M_{bd} = \begin{cases} 0 & \text{în faza simetrică,} \\ \mp \dfrac{K_b Q_d + K_d Q_b}{2}\sqrt{-\dfrac{1}{2aB\Theta}} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \qquad (65.28)$$

Pentru aceasta este necesar ca

$$K_b Q_a + K_a Q_b \neq 0.$$

În acest caz nu are importanță dacă coeficientul L_{ba} este sau nu diferit de zero.

Să examinăm acum variația coordonatei termodinamice, x_b, în cadrul unei tranziții de fază de speța a doua. În absența cîmpului electric și a tensiunilor mecanice, din formula (65.14) obținem

$$x_b = \begin{cases} R_b^{(0)}\Theta & \text{în faza simetrică,} \\ \left(R_b^{(0)} - \dfrac{aQ_b}{2B}\right)\Theta \pm K_b\sqrt{-\dfrac{a\Theta}{2B}} & \text{în faza disimetrică.} \end{cases} \quad (65.29)$$

Relația (65.29) presupune că dilatarea termică și polarizarea piroelectrică se iau plecînd de la temperatura Curie. Termenii proporționali cu Θ se referă la acele componente ale deformației termice și polarizării piroelectrice care sînt diferite de zero în ambele faze, determinînd salturile coeficienților termodinamici, R_b, corespunzători.

Un caracter cu totul diferit îl au coordonatele termodinamice spontane, diferite de zero, numai în faza disimetrică: componentele polarizării spontane și al deformației spontane sînt

$$x_b^{(sp)} = \pm K_b\sqrt{-\frac{a\Theta}{2B}}. \quad (65.30)$$

Ele vor fi egale cu zero în faza simetrică, pe cînd în faza disimetrică cresc repede (ca $|\Theta|^{1/2}$) cu îndepărtarea de la punctul Curie. Coordonata termodinamică spontană este proporțională cu parametrul de disimetrie (v. formulele (65.6) și (65.30)) și, de aceea, în cadrul studiului tranzițiilor în care apare o coordonată spontană, ea poate fi utilizată drept parametru de disimetrie. Astfel, în cazul studiului tranzițiilor seignettoelectrice, ca parametru de disimetrie se folosește, adesea, polarizarea spontană. Există însă numeroase tranziții de fază de speța a doua, care nu sînt însoțite de apariția coordonatelor spontane; așa sînt, de exemplu, tranzițiile din cuarț, din salpetru de sodiu, din alamă, din trioxid de wolfram, din aliaj heussler.

O clasă importantă de tranziții de fază de speța a doua o constituie *tranzițiile siegnettoelectrice* — tranziții în care apare

polarizarea spontană*. Pentru aceasta este necesar ca în clasa cristalografică a fazei seignettoelectrice numărul de componente independente ale vectorului de material să fie mai mare decît numărul lor în clasa fazei paraelectrice (în cazul tranzițiilor seignettoelectrice faza simetrică este numită, de obicei, fază *paraelectrică*, iar cea disimetrică, *seignettoelectrică*). Din această cauză, faza seignettoelectrică se referă totdeauna la una dintre clasele piroelectrice; faza paraelectrică aparține, de obicei, uneia dintre clasele nepiroelectrice, cu toate că în principiu prin intermediul modificațiilor seignettoelectrice pot fi legate, de exemplu, modificații ale claselor $mm2$ și m, 2 și 1, m și 1.

În cazul particular al reducerii la jumătate a simetriei, singurul caz pe care îl și studiem aici, tranziția seignettoelectrică este caracterizată prin faptul că va fi diferit de zero cel puțin unul dintre coeficienții K_i ($i = 1, 2, 3$). În acest caz, așa cum s-a arătat mai sus (v. relația (65.26), pe măsură ce ne apropiem de punctul Curie, cel puțin una dintre componentele tensorului permitivității dielectrice crește ca $|\Theta|^{-1}$, astfel încît în faza paraelectrică ea crește de două ori mai repede decît în cea seignettoelectrică

$$\varkappa_{ij} = \begin{cases} \dfrac{2\pi K_i K_j}{a\Theta} & \text{în faza paraelectrică,} \\ -\dfrac{\pi K_i K_j}{a\Theta} & \text{în faza seignettoelectrică} \\ & (i, j = 1, 2, 3) \end{cases} \qquad (65.31)$$

Pentru tranzițiile seignettoelectrice mai este caracteristică, de asemenea, apariția în faza seignettoelectrică a unor coeficienți piezoelectrici, care cresc odată cu apropierea de punctul Curie ca $|\Theta|^{-1/2}$. Asemenea coeficienți piezoelectrici sînt

$$d_{i\lambda} = \begin{cases} 0 & \text{în faza paraelectrică,} \\ \mp \dfrac{K_i Q_{3+\lambda}}{2} \sqrt{-\dfrac{1}{2aB\Theta}} & \text{în faza seignettoelectrică} \\ & (i = 1, 2, 3;\ \lambda = 1, \ldots, 6). \end{cases} \qquad (65.32)$$

* Privind seignettoelectricitatea se pot consulta următoarele lucrări: Känzig (1960); Jona și Shirane (1965); Jeludev (1968 și 1973); Smolenski și Krainik (1968); Burfoot (1970); Sonin și Strukov (1970); Smolenski, Bokov, Isupov, Krainik, Pasinkov și Șur (1971); Vaks (1973). În special asupra simetriei modificațiilor cristaline, legate de tranzițiile seignettoelectrice, de văzut: Jeludev și Șuvalov (1956); Sonin și Jeludev (1959); Indenbom (1960, a); Șuvalov (1963 și 1970); Lavniuk și Sannikov (1971).

Dintre aceştia, trei sînt în orice caz diferiţi de zero, deoarece coeficienţii Q_4, Q_5 şi Q_6 nu devin zero în nici o clasă cristalografică.

Acestea sînt proprietăţile comune tuturor seignettoelectricelor. Tabelul 65.1 arată cum se manifestă ele în cazul a şase cristale seignettoelectrice.

În cazul unora dintre tranziţiile seignettoelectrice, pe lîngă polarizarea spontană apare şi o deformare spontană; asemenea tranziţii există în dihidrofosfatul de potasiu şi în sarea Seignette. În acest caz, în afară de unul dintre coeficienţii K_i $(i = 1, 2, 3)$ mai este diferit de zero şi unul dintre coeficienţii $K_{3+\lambda}$ $(\lambda=1,\ldots,6)$. În domenii de tipuri diferite, atît polarizarea spontană cît şi deformarea spontană au semne opuse; prin urmare, semnul deformării spontane este dat de semnul polarizării spontane, aşa cum se vede din figura 65.2. În cazul acestor tranziţii, odată cu apropierea de punctul Curie nu numai coeficientul permitivităţii dielectrice creşte ca $|\Theta|^{-1}$, ci şi unul dintre coeficienţii deformabilităţii elastice

$$s_{\lambda\mu} = \begin{cases} \dfrac{K_{3+\lambda}K_{3+\mu}}{2a\Theta} & \text{în faza paraelectrică,} \\ -\dfrac{K_{3+\lambda}K_{3+\mu}}{4a\Theta} & \text{în faza seignettoelectrică} \end{cases} \qquad (65.33)$$

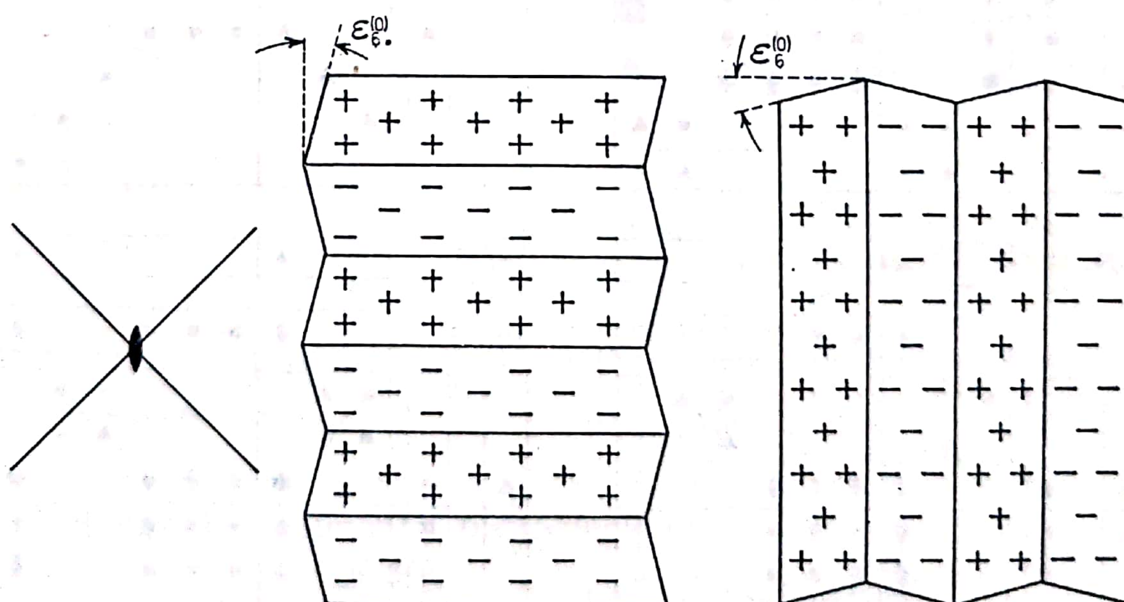


Fig. 65.2. Polarizarea spontană şi deformarea spontană a domeniilor modificaţiei seignettoelectrice (*mm*2) a dihidrofosfatului de potasiu. În stînga este dată orientarea elementelor de simetrie. Deformarea spontană, $\varepsilon_6^{(0)}$, este reprezentată exagerat.

Tabelul 65.1

Variaţiile proprietăţilor fizice ale cristalelor în cazul unor tranziţii de fază de speţa a doua

2/m | 2/m

2 | m

222 | mmm

2||X | mm2

422 | $\bar{4}2m$

4 | mm2

$\bar{3}m$ 622

$\bar{3}m$ 32

Notații

Mărimea	În faza simetrică	În faza disimetrică
▲	egală cu zero	$\sim\sqrt{\lvert\theta\rvert}$
◆	egală cu zero	$\sim\frac{1}{\sqrt{\lvert\theta\rvert}}$
★	$\sim\frac{2}{\lvert\theta\rvert}$	$\sim\frac{1}{\lvert\theta\rvert}$
■	în timpul tranziției suferă un salt	
●	nu este egală cu zero, nu suferă salt	

1 — polarizare spontană; 2 — deformație spontană; 3 — coeficienți piroelectrici; 4 — coeficienți ai dilatării termice; 5 — coeficienți ai permitivității dielectrice; 6 — coeficienți piezoelectrici; 7 — coeficienți ai deformabilității elastice. Celelalte notații sînt ca și în tabelul 58.5. Toate schemele sînt simetrice în raport cu diagonala principală.

1 2

3 4

5 6

7

Notă. În clasa 422, în 6, primele două romburi sînt unite cu o linie; în clasa 622, în 7, în dreapta jos este un X.

și unul dintre coeficienții piezoelectrici

$$d_{i\lambda} = \begin{cases} \dfrac{K_i K_{3+\lambda}}{2a\Theta} & \text{în faza paraelectrică,} \\[2ex] -\dfrac{K_i K_{3+\lambda}}{4a\Theta} & \text{în faza seignettoelectrică.} \end{cases} \tag{65.34}$$

În afară de aceasta, unii coeficienţi ai deformabilităţii elastice, diferiţi de zero numai în faza seignettoelectrică, cresc în apropiere de punctul Curie ca

$$s_{\lambda\mu} =$$

$$= \begin{cases} 0 & \text{în faza paraelectrică,} \\ \mp \dfrac{K_{3+\lambda}Q_{3+\mu} + K_{3+\lambda}Q_{3+\mu}}{2} \sqrt{-\dfrac{1}{2aB\Theta}} & \text{în faza seignettoelectrică.} \end{cases} \quad (65.35)$$

Aceste particularităţi ale tranziţiilor seignettoelectrice în sarea Seignette şi în dihidrofosfat de potasiu sînt date, de asemenea, în tabelul 65.1.

Dacă se studiază şi tranziţiile seignettoelectrice însoţite de modificări ale simetriei mai mult decît de două ori (ca, de exemplu, tranziţia seignettoelectrică în titanatul de bariu), gama deosebirilor creşte şi mai mult. Însă pe fondul deosebirilor apar şi mai pregnant în evidenţă proprietăţile comune ale tuturor tranziţiilor seignettoelectrice: apariţia polarizării spontane; creşterea ca $|T - T_c|^{-1}$ a unuia dintre coeficienţii permitivităţii dielectrice în cazul apropierii de punctul Curie, atît în regiunea seignettoelectrică, cît şi în regiunea paraelectrică, fiind valabilă, totodată, legea dublării; existenţa proprietăţilor piezoelectrice în cadrul modificaţiei seignettoelectrice, cu toate că unii coeficienţi piezoelectrici ating, în apropierea punctului Curie, valori foarte mari.

Valorile foarte mari ale coeficienţilor permitivităţii dielectrice şi ale coeficienţilor piezoelectrici fac posibile diferite aplicaţii tehnice ale materialelor seignettoelectrice.

În cazul multor tranziţii de fază de speţa a doua, proprietăţile fizice ale cristalelor fac să apară anomalii, care sînt mai puţin importante decît în cazul substanţelor seignettoelectrice. Astfel, pentru tranziţia $\alpha-\beta$ în cuarţ, studiată de I. A. Iakovlev (1957), nici unul dintre coeficienţii termodinamici nu atinge valori anormal de mari; în faza disimetrică (clasa 32) apar un nou coeficient al deformabilităţii elastice şi un coeficient piezoelectric, care cresc odată cu scăderea temperaturii ca $|\Theta|^{1/2}$ (v. tab. 65.1). În cazul tranziţiei de fază din salpetru de sodiu (v. tab. 64.1), a căror teorie au propus-o Dzealoşinski şi Lifşiţ (1957), lungimea translaţiei elementare după direcţia axei principale de simetrie creşte de două ori, pe cînd grupul punctual nu se modifică. În cadrul acestor tranziţii de fază, este posibil numai un singur tip de variaţii ale

coeficienţilor termodinamici — salturile unora dintre ei. Acest fapt este confirmat de tabelul 65.1. O evaluare nu prea complicată arată că salturile coeficienţilor de dilatare termică şi de deformabilitate elastică sînt legate, în acest caz, prin relaţia

$$\frac{\Delta\alpha_1}{\Delta\alpha_3} = \frac{\Delta s_{11}}{\Delta s_{13}} = \frac{\Delta s_{12}}{\Delta s_{13}} = \frac{\Delta s_{13}}{\Delta s_{33}} = \frac{Q_1}{Q_3}. \qquad (65.36)$$

Dilatarea termică în cazul salpetrului de sodiu este puternic anizotropă: $\alpha_1 \approx 0{,}1\ \alpha_3$. Dzealoşinski şi Lifşiţ au presupus că şi salturile acestor mărimi sînt legate aproximativ tot prin aceleaşi relaţii. În acest caz pot fi înţelese perfect rezultatele experimentale ale lui Kornfeld şi Ciudinov (1957), care au determinat saltul coeficientului s_{33}, fără a găsi însă nici un salt pentru s_{11} şi s_{12}.

§ 66. METODELE MATEMATICE ALE TEORIEI TRANZIŢIILOR DE FAZĂ

Aşa cum s-a remarcat în § 64, cînd două modificaţii cristaline sînt legate între ele printr-o tranziţie de fază de speţa a doua, grupul spaţial G_D al uneia dintre modificaţii este un subgrup al grupului spaţial G al celeilalte modificaţii $G_D \subset G$. Aceasta este însă numai o condiţie necesară, dar nici pe departe şi suficientă; elucidarea celorlalte condiţii pe care trebuie să le satisfacă grupurile de simetrie ale modificaţiilor cristaline, legate de tranziţiile de speţa a doua ocupă un loc important în lucrările fundamentale de teoria tranziţiilor de fază (Landau, 1937; Lifşiţ, 1941; Landau şi Lifşiţ, 1964), necesitînd utilizarea unui aparat matematic relativ complicat şi, în primul rînd, a teoriei reprezentărilor grupurilor (de aceea, vom presupune că cititorul acestui paragraf este familiarizat cu teoria reprezentărilor grupurilor spaţiale — v. Landau şi Lifşiţ (1963, § 94, 95 şi 1964, § 136); Liubarski (1957); Petraşen şi Tihonov (1967); Streitwolf (1971); Bir şi Pikus (1972)). Este mai comod să considerăm că grupul G al modificaţiei simetrice este dat, iar grupurile G_D ale modificaţiei disimetrice, care pot fi puse în legătură cu modificaţia simetrică a tranziţiei de fază de speţa a doua, sînt cele care trebuie găsite.

Pentru aceasta vom defini în punctul tranziţiei de fază funcţia de densitate microscopică $\rho(x_1, x_2, x_3)$ a cristalului; ea este invariantă faţă de grupul spaţial G. Într-o modificaţie disimetrică funcţia de densitate va fi egală cu $\rho + \delta\rho$, unde $\delta\rho$ este invariantă numai faţă de grupul G_D, dar nu şi faţă de grupul G. Plecînd

de la această funcție, $\delta\rho$, putem construi funcțiile $\varphi_\alpha^{(m)}(\alpha=1,\ldots,n_m)$ care să fie tot reale, liniar independente și astfel normate încît, pe de-o parte, fiecare dintre ele să se transforme după o anumită reprezentare fizic ireductibilă, Γ_m, avînd dimensiunea n_m a grupului spațial G, iar pe de altă parte, ca $\delta\rho$ să se reprezinte sub forma combinației liniare

$$\delta\rho = \sum_m \sum_\alpha c_\alpha^{(m)} \varphi_\alpha^{(m)}. \tag{66.1}$$

(Am numit aici fizic ireductibilă orice reprezentare ireductibilă reală, sau suma a două reprezentări ireductibile imaginare complex-conjugate.) În însuși punctul tranziției, toți coeficienții $c_\alpha^{(m)}$ sînt egali cu zero, iar în modificația disimetrică cel puțin unul dintre coeficienții corespunzători reprezentării neunitare va fi diferit de zero, întrucît, în caz contrar, simetria nu s-ar modifica prin tranziție. Rezultă deci că printre reprezentările ireductibile, ale căror funcții fundamentale sînt conținute în dezvoltarea (66.1), există cel puțin una neunitară.

Coeficienții $c_\alpha^{(m)}$, corespunzători reprezentărilor neunitare, determină semnificația termenilor neinvarianți față de grupul G din expresia funcției de densitate a fazei disimetrice, (66.1), avînd deci și rolul de parametru multidimensional al disimetriei. Acești coeficienți depind de codițiile exterioare; pentru a preciza ideile, vom considera că aceste condiții exterioare sînt date prin forțele termodinamice generalizate, T și $\boldsymbol{X} = (X_1,\ldots,X_9)$. În teoria tranzițiilor de fază de speța a doua este convenabil să considerăm provizoriu potențialul termodinamic Φ al modificației disimetrice ca funcție nu numai de forțele termodinamice, ci și de componentele parametrului de disimetrie, $\boldsymbol{c}$, urmînd ca abia după aceasta să găsim componentele parametrului $\boldsymbol{c}$ ca funcție de temperatură,

$$c_\alpha^{(m)} = c_\alpha^{(m)}(T)$$

din condiția

$$\left(\frac{\partial\Phi(T, \boldsymbol{X};\, \boldsymbol{c})}{\partial c_\alpha^{(m)}}\right)_{\boldsymbol{X}=0} = 0. \tag{66.2}$$

Ecuațiile (66.2) rezultă din condiția de minim pentru potențialul termodinamic cînd forțele termodinamice sînt date. Tot din aceeași condiție rezultă și matricea

$$\left\|\left(\frac{\partial^2\Phi(T, \boldsymbol{X};\, \boldsymbol{c})}{\partial c_\alpha^{(m)}\partial c_\beta^{(l)}}\right)_{\boldsymbol{X}=0}\right\|,$$

care este pozitiv definită.

Potențialul termodinamic al fazei disimetrice, așa cum s-a explicat în § 65, trebuie să fie invariant față de grupul spațial G al fazei simetrice, ceea ce face ca dependența lui de coeficienții $c_\alpha^{(m)}$ să se reducă la dependența față de invarianții formați din acești coeficienți. În vecinătatea imediată a punctului de tranziție, $c_\alpha^{(m)}$ sînt mici, astfel încît rolul principal revine invarianților de ordin inferior. În general, numărul invarianților de grad s, liniar independenți, care pot fi formați din componentele unei mărimi ce se transformă după o reprezentare B a grupului G va fi egal cu numărul de reprezentări unitare conținute în reprezentarea $[B^s]$, adică cu ordinul s al simetriei reprezentării B. Acest număr este

$$m_G(B, s) = \frac{1}{N(G)} \sum_{g \in G} [\chi_B^s](g), \tag{66.3}$$

$N(G)$ fiind ordinul grupului G, iar $[\chi_B^s]$ — ordinul s al simetriei caracterului reprezentării, B; v. Liubarski, 1957. Însă din niște mărimi care se transformă după o reprezentare fizic ireductibilă, în general nu se pot forma invarianți liniari, iar fiecare dintre aceste reprezentări posedă numai un singur invariant pătratic; printr-o alegere convenabilă a bazei, $\varphi_1^{(m)}, \ldots, \varphi_n^{(m)}$, acesta se poate reprezenta sub formă de sumă a pătratelor componentelor. Astfel, în ipoteza că există posibilitatea dezvoltării potențialului termodinamic în serie, după componentele parametrului de disimetrie, vom obține că primii termeni ai acestei dezvoltări sînt de forma

$$\Phi = \Phi_0 + \sum_m A^{(m)} \sum_{\alpha=1}^{n_m} (c_\alpha^{(m)})^2 + \ldots,$$

în care $A^{(m)} = A^{(m)}(T, X)$ sînt funcții de forțele termodinamice.

Într-o modificație simetrică potențialul termodinamic trebuie să fie minim atunci cînd toți $c_\alpha^{(m)}$ sînt egali cu zero, iar în cea disimetrică, cînd cel puțin cîțiva dintre aceștia sînt diferiți de zero. Deoarece suma pătratelor este totdeauna pozitivă, prima condiție va fi satisfăcută cînd toate funcțiile $A^{(m)}$ sînt pozitive, iar a doua, cînd cel puțin unele dintre ele sînt negative. Evident, în punctul de tranziție ele se anulează. Deoarece fizic este prea puțin probabil ca fără nici un motiv special un număr de funcții, independente $A^{(m)}(T, X)$ să se anuleze toate în aceleași condiții- $T = T_c$, $X = 0$, este normal ca o singură funcție să devină zero și deci tranziția va fi legată de o singură transformare fizic ireductibilă, — anume aceea pentru care se anulează coeficientul lui A. Aceasta va fi tocmai reprezentarea după care se și transformă componentele c_α ale parametrului de disimetrie, ce

definește tranziția dată. În consecință, variația funcției de densitate, (66.1), poate fi scrisă sub forma

$$\delta\rho = \sum_{\alpha=1}^{n} c_\alpha \varphi_\alpha ; \tag{66.4}$$

în condițiile (66.2) pot fi omiși și indicii m.

Chiar în punctul tranziției se pare că primul termen al dezvoltării potențialului termodinamic, care este diferit de zero, este o combinație de invarianți cubici ai parametrului de disimetrie. Invarianții de gradul trei au semnul esențialmente variabil, astfel încît pentru ca potențialul termodinamic să fie minim în punctul tranziției ei trebuie să lipsească din dezvoltarea potențialului. Întrucît pe de altă parte nu există încă nici un motiv să presupunem că coeficienții acestor invarianți se vor anula exact la aceeași temperatură ca și coeficientul lui A, nu ne rămîne decît să cerem ca reprezentarea Γ să nu admită, în general, existența invarianților de gradul trei, adică, conform lui (66.3), să fie satisfăcută condiția

$$\sum_{g \in G} [\chi_\Gamma^3](g) = 0. \tag{66.5}$$

Ea a fost introdusă de L. D. Landau (1937).

Rezultă deci că dezvoltarea potențialului termodinamic este de forma

$$\Phi = \Phi_0 + A \sum_{\alpha=1}^{n} (c_\alpha)^2 + \sum_i B_i f_i^{(4)}(c) + \ldots, \tag{66.6}$$

în care $f_i^{(4)}(c)$ sînt invarianți de gradul patru, liniar independenți, formați din componentele parametrului de disimetrie, iar B_i — niște funcții de forțe termodinamice generalizate, considerate în primă aproximație constante (de comparat dezvoltările (65.1) și (65.7)).

Condiția lui Landau, (66.5), nu epuizează restricțiile impuse reprezentării Γ, după care s-ar putea transforma parametrul de disimetrie. Este vorba despre faptul că în realitate reprezentările ireductibile ale grupurilor spațiale se numerotează cu ajutorul unui parametru continuu — vectorul $\boldsymbol{k}$ din prima zonă Brillouin a rețelei reciproce și, numai în cazul în care vectorului $\boldsymbol{k}$ îi corespund cîteva reprezentări ireductibile, numerotarea se mai face și prin numărul m. Din această cauză, coeficienții $A = A(\boldsymbol{k};\ T, X)$. Presupunînd că A sînt funcții suficient de netede de vectorul $\boldsymbol{k}$,

avem

$$A(\boldsymbol{k}_0+\delta\boldsymbol{k}) = A(\boldsymbol{k}_0) + \frac{\partial A(\boldsymbol{k}_0)}{\partial \boldsymbol{k}}\cdot\delta\boldsymbol{k} + \frac{1}{2}\,\frac{\partial^2 A(\boldsymbol{k}_0)}{\partial \boldsymbol{k}\,\partial \boldsymbol{k}} : \partial\boldsymbol{k}\delta\boldsymbol{k} + \dots \tag{66.7}$$

Să presupunem că tranziţia este legată de reprezentarea $\Gamma(\boldsymbol{k}_0)$. Atunci în modificaţia simetrică toate cantităţile $A(\boldsymbol{k}_0+\delta\boldsymbol{k})$, din vecinătatea vectorului $\boldsymbol{k}_0$ sînt pozitive; pe măsura apropierii temperaturii de punctul Curie, ele se micşorează, astfel că în final chiar în punctul de tranziţie $A(\boldsymbol{k}_0)$ ia valoarea zero, $A(\boldsymbol{k}_0+\delta\boldsymbol{k})$ rămînînd în continuare tot pozitive. Pentru aceasta este însă necesar ca funcţia $A(\boldsymbol{k})$ să aibă un minim pentru $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_0$, adică din dezvoltarea (66.7) termenii liniari să lipsească, iar cei pătratici să fie pozitivi. Anularea derivatei $\partial A/\partial\boldsymbol{k}$ pentru $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_0$ se poate datora simetriei vectorului $\boldsymbol{k}_0$. Într-adevăr, această derivată este un vector invariant faţă de grupul punctual de simetrie, $H(\boldsymbol{k}_0)$, al vectorului $\boldsymbol{k}_0$. Dacă acest grup nu lasă invariantă nici o direcţie, adică aparţine unuia dintre cele 22 grupuri punctuale cristalografice nepiroelectrice, derivata $\partial A/\partial\boldsymbol{k}$, pentru $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_0$ se anulează inevitabil. Celălalt caz pe care ni l-am putea imagina cînd anularea simultană a lui $A(\boldsymbol{k}_0)$ şi $\partial A(\boldsymbol{k}_0)/\partial\boldsymbol{k}$ n-ar fi determinată de simetria vectorului $\boldsymbol{k}_0$, ci de proprietăţile speciale ale funcţiei $A(\boldsymbol{k})$, nici nu poate fi luat în consideraţie, deoarece în acest caz $\boldsymbol{k}$ ar trebui să aibă o variaţie continuă, odată cu variaţia condiţiilor exterioare (de exemplu, presiunea), adică faza disimetrică nu va mai fi un cristal. Prin urmare, reprezentarea fizic ireductibilă, $\Gamma(\boldsymbol{k})$, legată de o transformare de fază de speţa a doua, trebuie să fie caracterizată de un vector $\boldsymbol{k}$ avînd grupul de simetrie $H(\boldsymbol{k})$ nepiroelectric. Totodată, din faptul că reprezentarea $\Gamma(\boldsymbol{k})$ este reală, rezultă că în steaua vectorului $\boldsymbol{k}$ trebuie să intre şi vectorul $-\boldsymbol{k}$, chiar dacă acest fapt nu este cerut de simetria cristalului, deci în definiţia grupului $H(\boldsymbol{k})$ trebuie înlocuită clasa cristalografică a cristalului prin clasa sa Laue (adică dacă cristalul nu are centru de simetrie, să se adauge la elementele sale de simetrie şi un centru de simetrie).

Condiţia prezentată mai sus a fost introdusă de E. M. Lifşiţ (1941) ca un corolar al condiţiei mai generale, de aceea, o vom denumi condiţia Lifşiţ redusă (pentru prezentarea ei s-a apelat şi la lucrarea lui Dzealoşinski (1964); la aceeaşi concluzie a ajuns şi Haceaturean (1965), însă pe baza unor consideraţii întrucîtva diferite).

Dzealoşinski (1964) a remarcat că mai corect ar fi să se pună condiţia de anulare a termenului liniar în $\delta\boldsymbol{k}$ din dezvoltarea potenţialului termodinamic după puterile lui $\delta\boldsymbol{k}$, iar în dezvoltare,

pe lîngă termenii deja examinaţi,

$$\delta \boldsymbol{k} \cdot \frac{\partial A(\boldsymbol{k}_0)}{\partial \boldsymbol{k}} \sum_{\alpha} (c_\alpha)^2,$$

poate intra — dacă reprezentarea $\Gamma(\boldsymbol{k}_0)$ nu este unidimensională — şi un termen de forma

$$\delta \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{v}(c_1, \ldots, c_n)$$

în care $\boldsymbol{v}$ este o mărime pătratică în componentele c_i şi care se transformă ca un vector în cadrul tuturor transformărilor din grupul $G_{\boldsymbol{k}_0}$. Din această cauză, reprezentarea $\Gamma(\boldsymbol{k})$ trebuie să satisfacă condiţia

$$\sum_{g \in G_{\boldsymbol{k}}} \chi_V(g)[\chi_\Gamma^2](g) = 0, \tag{66.8}$$

care cere ca din dezvoltarea potenţialului termodinamic să lipsească termenii liniari în $\delta \boldsymbol{k}$ şi cei pătratici în c_α. Aici s-a folosit formula (66.3); χ_V este caracterul reprezentării vectoriale, $[\chi_\Gamma^2]$ fiind pătratul simetric al caracterului reprezentării Γ. Condiţia (66.8) ar trebui desigur să fie denumită condiţia Dzealoşinski; ea este ceva mai rigidă decît condiţia Lifşiţ redusă.

Condiţia generală Lifşiţ constă în a cere ca componentele parametrului de disimetrie, c_α, să nu depindă de coordonatele spaţiale. Pentru aceasta este necesar ca potenţialul termodinamic Φ, considerat ca funcţie de $\partial c_\alpha / \partial x_i$, să fie minim pentru $\partial c_\alpha / \partial x_i = 0$. Dezvoltarea respectivă are forma

$$\Phi = \Phi_0 + \sum_{\alpha, i} a_{\alpha i} \frac{\partial c_\alpha}{\partial x_i} + \sum_{\alpha, \beta, i} b_{\alpha\beta i} \left(c_\alpha \frac{\partial c_\beta}{\partial x_i} + c_\beta \frac{\partial c_\alpha}{\partial x_i} \right) + \\ + \sum_{\alpha, \beta, i} d_{\alpha\beta i} \left(c_\alpha \frac{\partial c_\beta}{\partial x_i} - c_\beta \frac{\partial c_\alpha}{\partial x_i} \right) + \ldots, \tag{66.9}$$

în care $a_{\alpha i}$, $b_{\alpha\beta i}$, $d_{\alpha\beta i}$ sînt nişte coeficienţi constanţi, setul $b_{\alpha\beta i}$ fiind simetric, iar $d_{\alpha\beta i}$ antisimetric la permutarea indicilor α şi β. Considerînd potenţialul termodinamic al întregului cristal, adică integrala $\int \Phi \mathrm{d} V$, ajungem la concluzia că important este numai ultimul termen al dezvoltării (66.9), deoarece, după aplicarea teoremei Gauss-Ostrogradski, ceilalţi termeni se reduc la integra-

lele de suprafaţă ale lui c_α şi $c_\alpha c_\beta$. Prin urmare, anularea acestui termen trebuie să rezulte din proprietăţile reprezentării Γ. Coeficienţii $d_{\alpha\beta i}$ se transformă după reprezentarea $V\{\Gamma^2\}$ — produsul dintre reprezentarea vectorială V a grupului G şi pătratul antisimetric al reprezentării Γ. Pe urmă, întrucît coeficienţii $d_{\alpha\beta i}$ intră în dezvoltarea potenţialului termodinamic, ei trebuie să fie invarianţi faţă de grupul G. Numărul acestor invarianţi este egal cu numărul reprezentărilor unitare din reprezentarea (în general) reductibilă, $V\{\Gamma^2\}$, şi pentru ca tranziţia să fie posibilă acest număr trebuie să fie egal cu zero

$$\sum_{g\in G} \chi_V(g)\,\{\chi_\Gamma^2\}(g) = 0. \tag{66.10}$$

Aici am făcut uz de relaţia (66.3); χ_V este caracterul reprezentării vectoriale a grupului G, iar $\{\chi_\Gamma^2\}$—pătratul antisimetric al caracterului reprezentării Γ. Expresia (66.10) reprezintă tocmai condiţia generală Lifşiţ; condiţia Lifşiţ redusă este o consecinţă a acesteia; v. Lifşiţ (1941); Landau şi Lifşiţ (1964); Liubarski (1957).

Condiţiile (66.8) şi (66.10) pot fi considerate condiţii mai rigide decît condiţia Lifşiţ redusă, care poate fi considerată una dintre pietrele unghiulare ale teoriei, determinînd, în mare măsură, caracterul aparatului matematic al acesteia. Vectorii $\boldsymbol{k}$, ce satisfac această condiţie sînt egali sau cu zero, sau sînt egali cu o doime, o treime sau un sfert din vectorul reţelei reciproce. În primul caz — care a fost studiat amănunţit de către Indenbom (1960) — grupul translaţiilor T al fazei simetrice este inclus în nucleul homomorfismului reprezentării Γ, astfel încît aceasta va fi o reprezentare a grupului spaţial al modificaţiei simetrice; în acest caz, simetria de translaţie a cristalului, în general, nu se modifică. În celelalte cazuri în nucleul homomorfismului reprezentării Γ va intra nu chiar grupul translaţiilor însuşi, ci măcar subgrupul său, $T_{\{\boldsymbol{k}\}}$ de indice nu prea mare; el constă din toate translaţiile, $\boldsymbol{t} \in T$, pentru care $\boldsymbol{t}\cdot\boldsymbol{k}$ este egal cu zero sau cu un număr întreg pentru orice $\boldsymbol{k}$ din steaua $\{\boldsymbol{k}\}$. Reprezentarea Γ va fi din nou reprezentarea unui grup de ordin finit, nedepăşind produsul dintre ordinul grupului punctual al fazei simetrice şi indicele lui $T_{\{\boldsymbol{k}\}}$ în raport cu T. Tocmai aceasta permite să exprimăm proprietăţile reprezentării Γ a grupului infinit G în limbajul teoriei grupurilor finite.

Dacă steaua $\{\boldsymbol{k}\}$ conţine cîţiva vectori, atunci grupurile translaţiilor care definesc reţelele Bravais posibile, pentru fazele cu simetrie redusă pot fi generate nu de către toţi vectorii $\boldsymbol{k}_1, \ldots, \boldsymbol{k}_q$, pe care îi cuprinde steaua, ci fie de unul dintre ei (de exemplu, $T_{\boldsymbol{k}_1}$), fie de o pereche de vectori ($T_{\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_2}$, $T_{\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_3}$ etc.), ..., fie de un set de $q-1$ vectori. Spre deosebire de grupul $T_{\{\boldsymbol{k}\}}$, care defineşte

rețele Bravais de aceleași singonii ca ale rețelei inițiale, acestor grupuri le corespund rețele Bravais de singonii mai reduse.

Toate modificările posibile ale rețelei cristaline Bravais au fost calculate de E. M. Lifșiț (1941); ele sînt date în tabelul 66.1. Cînd lucrăm cu el, trebuie să avem în vedere că în afară de simetria de translație a cristalului poate să se reducă și simetria de rotație, iar, drept urmare, rețeaua să se deformeze ușor; acest fapt nu este reflectat în tabel, rețelele Bravais fiind atribuite în tabel sistemului celui mai simetric, căruia, în general, i-ar putea aparține. Dar, oricare ar fi simetria reală a rețelei obținute, în ea vor intra acele, și numai acele noduri, care sînt date în tabel

În prima și în cea de a doua coloană a tabelului 66.1 sînt cuprinse rețelele Bravais ale modificațiilor simetrică și disimetrică. În a treia coloană modificația disimetrică este definită prin vectorii bazei, $\boldsymbol{a}_i$, ai rețelei primitive, pentru faza simetrică; o celulă cu baza centrată a fazei inițiale este definită de vectorii $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$; $1/2\ (\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2)$; una cu fețele centrate, prin vectorii $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$; $1/2\ (\boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{a}_3)$, $1/2\ (\boldsymbol{a}_3 + \boldsymbol{a}_1)$, $1/2\ (\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2)$; una centrată în volum prin vectorii $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$; $1/2\ (\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{a}_3)$; în rețeaua romboedrică, vectorii $\boldsymbol{a}_i$ sînt luați după muchiile romboedrului elementar. În coloana a patra este trecut numărul care arată de cîte ori crește numărul de atomi din celula elementară în cazul tranziției de fază, sau, ceea ce este același lucru, de cîte ori se reduce simetria de translație; vom nota acest număr cu N_t.

Tabelul 66.1 arată că perioadele rețelei se dublează în majoritatea cazurilor, în rețelele cu fețele centrate sau cu volum centrat, unele perioade putînd deveni de patru ori mai mari, iar în rețeaua hexagonală de trei ori. Volumul celulei poate crește însă de $N_t = 2, 3, 4, 6, 8, 16$ și 32 ori. Amintim că sînt posibile (și foarte răspîndite) tranziții de fază pentru care simetria de translație nu se modifică (v. § 64).

Să revenim la analiza reprezentării Γ. După cum s-a remarcat deja, grupul $T_{\{k\}}$ face parte din nucleul homomorfismului G_Γ al acestei reprezentări, astfel încît indicele său, $[T : T_{\{k\}}]$ față de grupul translațiilor, T, al modificației simetrice nu depășește, așa cum rezultă din tabelul 66.1, valoarea 32 (sînt posibile și valori ale indicelui $[T : T_{\{k\}}]$ egale cu valorile lui N_t din tabelul 66.1, pentru acele cazuri în care ambele rețele Bravais fac parte din aceeași singonie). Vom introduce în analiză mărimea $F = G/G_\Gamma$ — factor-grupul grupului spațial al cristalului, G, în raport cu subgrupul său invariant, G_Γ (asupra noțiunii de grup-factor, v., de exemplu, Wigner, 1961). Ordinul grupului F nu depășește produsul dintre indicele $[T : T_{\{k\}}]$ și ordinul grupului punctual al cristalului, K, adică, în orice caz, nu este mai mare de $32 \times 48 = 1536$. Reprezentarea Γ a grupului G servește ca reprezentare, și anume

Modificările rețelei Bravais în cazul tranzițiilor de fază de speța a doua

$P\bar{1}$	$P\bar{1}$	$2a_1,\ a_2,\ a_3$	2
$P2/m$	$P2/m$	$2a_1,\ a_2,\ a_3$	2
	$P2/m$	$a_1,\ a_2,\ a_3$	2
	$C2/m$	$2a_1,\ 2a_2,\ a_3;\ a_1 + a_2$	2
$C2/m$	$C2/m$	$a_1,\ a_2,\ 2a_3;\ a_1 + a_2$	2
	$P2/m$	$a_1,\ a_2,\ a_3$	2
	$P\bar{1}$	$a_1 + a_2,\ ½\,(a_1,\ - a_2),\ a_3$	2
	$C2/m$	$2a_1,\ 2a_2,\ a_3;\ a_1 + a_2$	4
$Pmmm$	$Pmmm$	$2a_1,\ a_2,\ a_3$	2
	$Cmmm$	$2a_1,\ 2a_2,\ a_3;\ a_1 + a_2$	2
	$Fmmm$	$2a_1,\ 2a_2,\ 2a_3;\ a_2 + a_3,\ a_3 + a_1,\ a_1 + a_2$	2
$Cmmm$	$Cmmm$	$a_1,\ a_2,\ a_3;\ ½\,(a_1 + a_2)$	2
	$Pmmm$	$a_1,\ a_2,\ a_3$	2
	$Immm$	$a_1,\ a_2,\ a_3;\ ½\,(a_1 + a_2 + 2a_3)$	2
	$P2/m$	$a_1,\ a_1 + a_2,\ ½\,(a_1 - a_2)$	2
	$C2/m$	$2a_1,\ 2a_3,\ ½\,(a_1 + a_2);\ a_1 + a_3$	2
	$Cmmm$	$2a_1,\ 2a_2,\ a_3;\ a_1 + a_2$	4
	$Fmmm$	$2a_1,\ 2a_2,\ 2a_3;\ a_2 + a_3,\ a_3 + a_1,\ a_1 + a_2$	4
$Fmmm$	$Cmmm$	$a_1,\ a_2,\ a_3;\ a_1 + a_2$	2
	$P\bar{1}$	$½\,(a_1 + a_2),\ ½\,(a_1 + a_3),\ a_2 + a_3$	2
	$C2/m$	$2a_1,\ 2a_2,\ ½\,(a_1 + a_3);\ a_1 + a_2$	4
	$Fmmm$	$2a_1,\ 2a_2,\ 2a_3;\ a_2 + a_3,\ a_3 + a_1,\ a_1 + a_2$	8
$Immm$	$Pmmm$	$a_1,\ a_2,\ a_3$	2
	$C2/m$	$2a_1,\ 2a_2,\ ½\,(a_1 + a_2 + a_3);\ a_1 + a_2$	2
	$Cmmm$	$2a_1,\ 2a_2,\ a_3;\ a_1 + a_2$	4
	$Fmmm$	$2a_1,\ 2a_2,\ 2a_3;\ a_2 + a_3,\ a_3 + a_1,\ a_1 + a_2$	4
$P4/mmm$	$P4/mmm$	$a_1,\ a_2,\ a_3$	2
	$P4/mmm$	$a_1 + a_2,\ a_1 - a_2,\ a_3$	2
	$I4/mmm$	$a_1 + a_2,\ a_1 - a_2,\ 2a_3;\ a_1 + a_3$	2
	$Pmmm$	$2a_1,\ a_2,\ a_3$	2
	$Cmmm$	$2a_1,\ 2a_3,\ a_2;\ a_1 + a_3$	2
	$P4/mmm$	$2a_1,\ 2a_2,\ a_3$	4
	$I4/mmm$	$2a_1,\ 2a_2,\ 2a_3;\ a_1 + a_2 + a_3$	4
$I4/mmm$	$P4/mmm$	$a_1,\ a_2,\ a_3$	2
	$Cmmm$	$a_1 + a_2,\ a_3,\ a_1 - a_2;\ ½\,(a_1 + a_2 + a_3)$	2
	$C2/m$	$a_1,\ a_2 + a_3,\ a_2 - a_3;\ ½\,(a_1 + a_2 + a_3)$	2
	$P4/mmm$	$a_1 + a_2,\ a_1 - a_2,\ a_3$	4
	$Cmmm$	$2a_1,\ 2a_3,\ a_2;\ a_1 + a_3$	4
	$P2/m$	$2a_1,\ 2a_2,\ ½\,(a_1 + a_2 + a_3)$	4
	$I4/mmm$	$a_1 + a_2,\ a_1 - a_2,\ 2a_3;\ a_1 + a_3$	4
	$I4/mmm$	$2a_1,\ 2a_2,\ 2a_3;\ a_1 + a_2 + a_3$	8

Tabelul 66.1 (continuare)

Pm3m	*P4/mmm*	$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3$	2
	P4/mmm	$\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$	2
	Fm3m	$2\mathbf{a}_1, 2\mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3;\ \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3, \mathbf{a}_3 + \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$	2
	P4/mmm	$2\mathbf{a}_1, 2\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$	4
	Im3m	$2\mathbf{a}_1, 2\mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3;\ \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3$	4
	Pm3m	$2\mathbf{a}_1, 2\mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3$	8
Im3m	*Pm3m*	$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$	2
	Cmmm	$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3, \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3;\ \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)$	2
	P4/mmm	$\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$	4
	P2/m	$2\mathbf{a}_1, 2\mathbf{a}_2, \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)$	4
	Fm3m	$2\mathbf{a}_1, 2\mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3;\ \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3, \mathbf{a}_3 + \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$	4
	Im3m	$2\mathbf{a}_1, 2\mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3;\ \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3$	8
Fm3m	*P4/mmm*	$\frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2), \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2), \mathbf{a}_3$	2
	R$\bar{3}$*m*	$\mathbf{a}_1 + \frac{1}{2}(\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3), \mathbf{a}_2 + \frac{1}{2}(\mathbf{a}_3 + \mathbf{a}_1), \mathbf{a}_3 + \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$	2
	Pm3m	$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$	4
	P2/m	$\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_3)$	4
	I4/mmm	$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3;\ \mathbf{a}_3 + \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$	4
	Fm3m	$2\mathbf{a}_1, 2\mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3;\ \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3, \mathbf{a}_3 + \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$	8
	P4/mmm	$2\mathbf{a}_1, 2\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$	16
	Pm3m	$2\mathbf{a}_1, 2\mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3$	32
R$\bar{3}$*m*	*R*$\bar{3}$*m*	$\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3, \mathbf{a}_3 + \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$	2
	C2/m	$\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3;\ \mathbf{a}_1$	2
	P2/m	$\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$	2
	C2/m	$2(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2), 2(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_3), \mathbf{a}_3;\ 2\mathbf{a}_1$	4
	R$\bar{3}$*m*	$\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3 + \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_3 + \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3$	4
	R$\bar{3}$*m*	$2\mathbf{a}_1, 2\mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3$	8
P6/mmm	*P6/mmm*	$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3$	2
	Pmmm	$\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$	2
	Cmmm	$\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3;\ \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_3$	2
	P6/mmm	$\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$	3
	P6/mmm	$2\mathbf{a}_1, 2\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$	4
	Fmmm	$2(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2), 2(\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2), 2\mathbf{a}_3;\ 2\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2+\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3$	4
	C2/m	$2\mathbf{a}_1, 2\mathbf{a}_3, 2\mathbf{a}_2;\ \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_3$	4
	P6/mmm	$\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3$	6
	P6/mmm	$2\mathbf{a}_1, 2\mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3$	8

Notă: Toţi ,,a" sînt, de fapt, vectori.

exactă, pentru grupul F: pentru diferiţi $f \in F$ vor corespunde matrice în Γ diferite. Deoarece reprezentarea Γ este reală, în spaţiul său purtător, L, se poate lua o bază vectorială $\partial_1, \ldots, \partial_n$ (n este dimensiunea reprezentării Γ) astfel încît matricele corespunzătoare să fie ortogonale. Aşadar, grupul abstract F poate fi realizat sub forma unui anumit grup de transformări ortogonale în spaţiul cu n dimensiuni — care să fie subgrupul n-dimensional al grupului ortogonal $O(n)$. Dacă grupul spaţial G este simmorf,

atunci ordinele elementelor F sînt, în mod obligatoriu, ordinele cristalografice : 1, 2, 3, 4, 6. Însă reprezentările grupurilor nesimmorfe, G, pot genera şi grupuri F, avînd unele dintre elemente de ordin necristalografic, de exemplu, 8 sau 12. Dimensiunea n a reprezentării Γ(şi totodată a spaţiului L) probabil nu este mai mare de 24. (Dimensiunea reprezentărilor ireductibile, care satisfac condiţia Lifşiţ redusă nu este mai mare ca 12, unele dintre acestea putînd fi complexe.)

Componentele parametrului de disimetrie, $c_1,\ldots,c_n$, le vom considera componente ale unui vector din spaţiul L, raportate la baza $\partial_1,\ldots,\partial_n$, menţionată deja, în care matricele reprezentării sînt ortogonale. Parametrul tranziţiei este, prin urmare, un vector din spaţiul L. Transformările care intră în grupul F, fiind aplicate vectorului de disimetrie, generează steaua vectorilor de disimetrie, $\{\boldsymbol{c}\}$. Dacă nici una dintre reprezentările grupului F nu lasă vectorul $\boldsymbol{c}$ imobil, atunci numărul de vectori din steaua $\{\boldsymbol{c}\}$ este egal cu ordinul grupului F. Dacă însă un anumit subgrup $F_{\boldsymbol{c}}$ al grupului F lasă vectorul $\boldsymbol{c}$ imobil, atunci numărul de vectori din steaua $\{\boldsymbol{c}\}$ va fi egal cu indicele $[F : F_{\boldsymbol{c}}]$ al grupului $F_{\boldsymbol{c}}$ faţă de F. Vectorii care formează steaua $\{\boldsymbol{c}\}$ corespund unor tipuri de domenii diferite ce iau naştere în cadrul tranziţiei. Grupul $F_{\boldsymbol{c}}$ defineşte univoc grupul spaţial al modificaţiei disimetrice, G_D : el reprezintă reuniunea tuturor claselor de congruenţă ale grupului spaţial G, în raport cu grupul lui invariant, G_Γ, care corespunde subgrupului $F_{\boldsymbol{c}}$, care este grup-factorul $F = G/G_\Gamma$:

$$G_D = \Sigma g_i G_\Gamma, \tag{66.11}$$

$g_i \in G$ fiind orice reprezentant al clasei congruente grupului G în raport cu subgrupul G_Γ, care corespunde elementului f_i al grupului $F_{\boldsymbol{c}}$. Dacă, de exemplu, grupul $F_{\boldsymbol{c}}$ se reduce la unitate, adică nici una dintre transformările neunitare ale grupului F nu lasă vectorul $\boldsymbol{c}$ imobil, atunci grupul G_D coincide pur şi simplu cu nucleul homomorfismului lui G_Γ. Evident, indicele $[G : G_D]$ al grupului G_D în raport cu grupul G, adică reducerea totală a simetriei, în cadrul tranziţiei de fază, va fi

$$N = [G : G_D] = [F : F_{\boldsymbol{c}}]. \tag{66.12}$$

Reducerea simetriei de rotaţie este $N_r = N/N_t$.

Prin urmare, problema inventarierii tuturor grupurilor spaţiale, G_D, ale modificaţiilor disimetrice, care pot fi puse în legătură cu o modificaţie simetrică dată, printr-o tranziţie de fază de speţa a doua, constă, în primul rînd, în aflarea tuturor reprezentărilor

ireductibile, Γ, ale grupului spaţial G al modificaţiei simetrice, care satisfac condiţia Lifşiţ redusă şi, în al doilea rînd, în determinarea pentru fiecare grup-factor, $F = G/G_\Gamma$, a tuturor subgrupurilor, care ar putea servi drept grupuri F_c. Prima etapă a problemei se rezolvă uşor cu ajutorul tabelelor reprezentărilor ireductibile ale grupurilor spaţiale (Kovalev, 1961 ; Fadeev, 1961). Cea de a doua etapă a problemei constă în găsirea pentru grupul F a acelor subgrupuri, care lasă imobil măcar un singur vector; aceste subgrupuri sînt analogurile n-dimensionale ale claselor piroelectrice (această problemă reprezintă deci generalizarea pentru n dimensiuni a problemei analoage, rezolvate în cadrul tridimensional de Jeludev şi Şuvalov (1956) în cadrul inventarierii tuturor tranziţiilor seignettoelectrice posibile). Toate matricele care intră într-un subgrup de acest fel au cel puţin o valoare proprie egală cu 1. Apoi, toate matricele care în ansamblu formează un astfel de subgrup au cel puţin un vector propriu comun, care corespunde valorii proprii 1.

Etapa următoare a cercetării ar fi trebuit să conste în excluderea tuturor tranziţiilor de fază „excedentare". În afară de tranziţiile ce corespund unor reprezentări care nu satisfac condiţiile (66.5), (66.8) sau (66.10), există printre ele unele care pot fi obţinute numai luînd în dezvoltarea (66.6) şi termenii următori. Pentru eliminarea acestor tranziţii (printre ele fiind, în particular, cele corespunzătoare grupurilor F_c, care sînt, la rîndul lor, subgrupuri ale altor grupuri de acelaşi fel), se poate verifica dacă grupul dat, G_D, poate sau nu să fie obţinut prin procedura obişnuită de rezolvare : înlocuirea dezvoltării (66.6) în ecuaţia (66.2), rezolvarea acestor ecuaţii şi determinarea grupurilor spaţiale, G_D, faţă de care expresia (66.4) să fie invariantă, după înlocuirea în ea a soluţiilor obţinute.

Pe urmă, în afara tranziţiilor de speţa a doua, prezintă interes şi tranziţiile de speţa întîi, apropiate de cele de speţa a doua. Pentru tratarea lor teoretică se folosesc metodele utilizate în teoria tranziţiilor de fază de speţa a doua, însă întrucîtva modificate (v., de exemplu, studiul tranziţiilor seignettoelectrice de speţa întîi, de Ghinzburg, 1949). Fireşte, o delimitare perfect riguroasă a acestor tranziţii nu este posibilă ; mai degrabă, faptul în sine că tratarea problemei simetriei şi proprietăţilor cristalului în apropierea temperaturii de tranziţie este posibilă folosind o variantă a teoriei tranziţiilor de fază de speţa a doua confirmă tocmai apropierea ce există între aceste tranziţii şi tranziţiile de speţa a doua. Din acest punct de vedere, lista grupurilor G_D, obţinute pe baza formulei (66.11) poate fi considerată o listă ce include totodată şi tranziţiile de speţa întîi. Remarcăm că considerentele pe baza cărora se demonstrează că parametrul de disi-

metrie, c, se transformă pentru o tranziţie de speţa a doua după o reprezentare fizic ireductibilă, în cazul unei transformări de speţa întîi devin mult mai puţin categorice. Întrucît anularea celor doi coeficienţi $A^{(m)}$ într-un interval îngust de temperatură, cu toate că este puţin probabilă, nu poate fi considerată complet exclusă, este normal să presupunem că nu toate transformările de speţa întîi, dar o mare parte dintre ele, pot fi definite printr-o reprezentare fizic ireductibilă (este posibil ca dintre transformările definite prin reprezentări reductibile să facă parte şi tranziţia $Pm3m$ — $Pnma$, observată într-o serie de cristale — de exemplu, în $CaTiO_3$; v. Cochran, Zia, 1968). Pentru grupul spaţial $Pm3m(O_h^1)$ se poate confrunta lista tranziţiilor de speţa a doua (Aleksandrov, Zinenko, Mihelson, Sirotin, 1969) cu lista care include şi tranziţiile de speţa întîi, definite printr-o reprezentare fizic ireductibilă (Vinberg, Gufan, Sahnenko, Sirotin, 1974).

Aşa apare metoda geometrică de găsire a grupurilor spaţiale G_D ale unei modificaţii disimetrice, legate de modificaţia simetrică (G) printr-o tranziţie de fază de speţa a doua, sau printr-o tranziţie de speţa întîi, apropiată de ea (Sirotin, 1967; Sirotin şi Mihelson, 1969; Gufan, 1971; Vinberg, Gufan, Sahnenko, Sirotin, 1974). Analiza grupurilor F şi F_c, care acţionează într-un spaţiu abstract al reprezentării Γ, care, la prima vedere, n-ar avea nici un sens fizic, îşi găseşte justificarea în faptul că fiecare dintre aceste grupuri reuneşte o întreagă mulţime de transformări, iar apartenenţa tranziţiilor la un anumit grup determină numeroasele lor proprietăţi comune, care ne scapă la o analiză superficială. Astfel de tranziţii sînt tocmai cele descrise în § 65, din subgrupul cu indicele 2: cu toate că prin modul de manifestare ele sînt extrem de variate, o parte considerabilă a abordării lor teoretice reuşeşte într-o formă unitară, ieşind astfel în evidenţă trăsăturile comune ale tuturor acestor tranziţii. În principiu, o analiză analoagă se poate face probabil şi pentru tranziţiile definite şi de alte grupuri F şi F_c. Deocamdată această metodă este folosită pentru studiul diferitelor tranziţii (Sirotin, 1967; Sirotin şi Mihelson, 1969; Gufan şi Sahnenko, 1972) ale variaţiei proprietăţilor fizice, ale analizei structurii domeniale ce ia naştere în cadrul unei tranziţii ş.a. (v., de asemenea, cercetările analoage realizate prin metode obişnuite — Levaniuk şi Sannikov, 1970; Dvořak, Dvořak, Petzelt, 1971). Pe lîngă aceasta, s-au scos în evidenţă o serie de proprietăţi comune ale tranziţiilor de fază, legate de reprezentările bidimensionale şi reprezentările tridimensionale, s-au găsit toate grupurile posibile F şi F_c pentru astfel de reprezentări (Gufan şi Sahnenko, 1972, a).

Schimbările proprietăţilor fizice ale cristalului la o tranziţie de fază sînt determinate calitativ de grupurile punctuale ale faze-

lor simetrică și disimetrică. Astfel, transformarea este seignetto-electrică, adică legată de apariția polarizării spontane, în cazul și numai în cazul în care numărul de componente independente ale dectorului pentru grupurile punctuale ale fazelor simetrică și visimetrică este diferit (v. Jeludev și Șuvalov, 1956). Exact la fel, pentru a apărea o deformare spontană, în cazul unei tranziții de fază, este necesar și suficient ca pentru aceste grupuri punctuale numărul de componente independente ale tensorului simetric de rangul doi să fie diferit. Aceste rezultate pot fi precizate incomparabil mai riguros dacă se ține cont și de poziția pe care o are reprezentarea Γ în sistemul de reprezentări ale grupului punctual K. Polarizarea spontană apare într-o tranziție de fază atît în cazul în care în reprezentarea vectorială V a grupului K intră însăși reprezentarea Γ, cît și în cazul în care în V intră numai o putere oarecare simetrică $[\Gamma^p]$ a acestei reprezentări. În primul caz însă, variațiile în funcție de temperatură ale polarizării spontane și ale permitivității dielectrice sînt determinate prin relațiile (65.30) și (65.31). În al doilea caz, polarizarea spontană crește odată cu îndepărtarea de punctul de tranziție, ca $|\Theta|^{p/2}$, pe cînd permitivitatea dielectrică nu mai tinde la infinit pentru $\Theta \to 0$; astfel de tranziții se numesc acum tranziții improprii; posibilitățile existenței lor au fost semnalizate pentru prima dată de Indenbom (1960, a); pentru amănunte asupra lor, vezi Lavaniuk și Sannikov, 1974. Analog, și tranzițiile ce au loc cu apariția unei deformări spontane se împart în tranziții proprii, cînd în reprezentarea $[V^2]$ a grupului K intră însăși reprezentarea Γ, și tranziții improprii, cînd în $[V^2]$ intră numai gradele lui simetrice. Dacă în cadrul tranziției se modifică simetria de tranziție a cristalului, atunci această tranziție va fi improprie în raport cu toate proprietățile fizice, dat fiind că în reprezentările grupului punctual K, oricare ar fi ele, nu pot intra decît puterile simetrice ale reprezentării Γ, dar nu ea însăși.

Analiza teoretică a teoriei grupurilor permite să se explice, de asemenea, dacă tranziția dată implică sau nu deplasări ale pozițiilor de echilibru ale atomilor: în primul caz reprezentarea Γ va face parte din reprezentarea de vibrație a grupului spațial G, al doilea nu. Această proprietate a tranziției depinde în mod esențial de tipul structural al cristalului, deoarece tocmai acesta determină însăși constituția reprezentării de vibrație a grupului spațial dat. În particular, în structurile care conțin atomi în stare grupată, orice transformare este însoțită de deplasări ale atomilor. Dimpotrivă, în structurile monoatomice, tranziția va fi însoțită de o deplasare a atomilor numai în cazul în care repre-

zentarea grupului punctual $H(\boldsymbol{k})$, generat de reprezentarea mică, $\Gamma_{\boldsymbol{k}}$, face parte din reprezentarea vectorială a grupului $H(\boldsymbol{k})$. Toate tranzițiile seignettoelectrice implică deplasări ale atomilor. Dintre tranzițiile ce nu pot fi însoțite de deplasări ale atomilor fac parte, de exemplu, transformările de fază din salpetru de sodiu și din aliajul CuZn (v. fig. 64.2 și tab. 64.1). Mai detaliat, pentru aceasta, vezi Sirotin și Mihelson (1968); Mihelson și Sirotin (1969).

Referitor la problemele abordate în acest capitol, se pot consulta lucrările: Burfoot (1970); Browt (1967); Vaks (1973); Jeludev (1968, 1969, 1973); Jona și Shirane (1965); Känzig (1960); Cady (1949); Landau și Lifșiț (1957 și 1964); Liubarski (1957); Mason (1952); Pasînkov și Șur (1971); Smolenski și Krainik (1968); Sonin și Stukov (1970); Haceaturean (1974).

CAPITOLUL 8

SIMETRIA MAGNETICĂ ÎN FIZICA CRISTALELOR

§ 67. INVERSIA TIMPULUI ŞI ANTISIMETRIA

Începutul simetriei magnetice a cristalelor se poate considera anul 1951, cînd a văzut lumina tiparului volumul cursului de fizică teoretică a lui L. D. Landau şi E. M. Lifşiţ, „Fizica statistică'' şi monografia lui A. V. Şubnikov, „Simetria şi antisimetria figurilor finite''. În „Fizica statistică'' s-a remarcat că studiind simetria cristalelor magnetice, este necesar să se examineze operaţia de inversie temporală şi combinaţiile acesteia cu translaţiile şi cu rotaţiile obişnuite de oglindire şi elicoidale. Landau şi Lifşiţ au menţionat că în acest caz se vor obţine noi grupuri, în număr foarte mare, care nu fuseseră încă obţinute de cineva — grupurile spaţiale ale simetriei magnetice a cristalelor. Să examinăm în acest sens operaţia de inversie a timpului.

La baza fizicii cristalelor stau legile mecanicii clasice şi ale electrodinamicii. După cum se ştie, ele sînt invariante faţă de grupul rotaţiilor: rotaţia sistemului de coordonate în care sînt scrise nu modifică forma acestor legi. Ele sînt invariante şi faţă de grupul ortogonal, adică faţă de mulţimea tuturor rotaţiilor proprii şi improprii posibile; trebuie să se ţină seama că în cazul rotaţiilor neproprii, vectorii cîmpului electric şi cîmpului magnetic se transformă diferit: primii ca nişte vectori obişnuiţi (polari), iar ceilalţi ca vectori axiali (pseudovectori).

Mai mult decît atît, legile mecanicii şi electrodinamicii sînt invariante şi faţă de transformarea $t' = -t$, adică faţă de *inversia timpului*, numai dacă se schimbă simultan şi semnele componentelor vectorului magnetic: $H_i' = -H_i$. Această lege de transformare rezultă natural din tabloul fizic al fenomenului: în cazul inversiei timpului, sensul tuturor curenţilor se inversează, inversîndu-se deci şi sensurile tuturor cîmpurilor magnetice; doar cîmpurile magnetice sînt produse de curenţii electrici.

Transformarea $t' = -t$ se numeşte *inversia timpului*. O vom nota cu $1'$; grupul care constă din elementul unitate şi inversia timpului va fi notat cu $1'$. Fireşte, inversia timpului nu este fizic realizabilă, însă la fel este şi inversia obişnuită. Nu numai timpul nu poate fi făcut s-o ia înapoi; exact la fel nu putem transforma un cristal de cuarţ în enantiomorful lui: pentru

aceasta ar trebui să desfacem mai întîi cristalul în atomii constituenți și apoi să construim atomii într-o altă ordine (în general, să se descompună corpul enantiomorf în părțile sale componente neenantiomorfe și să se construiască, din nou, cu ele, corpul enantiomorf ; existența unor asemenea părți componente neenantiomorfe pentru un anumit grad de divizare este condiția necesară pentru realizarea principială a acestei operații). Definiția transformării de simetrie trebuie, pur și simplu, să nici nu implice ipoteza posibilității realizării fizice a acestei transformări.

Dacă atașăm grupului ortogonal $\infty\infty\bar{1}$ (în acest context notația $\infty\infty\bar{1}$ este mai comodă decît notația echivalentă, folosită în mod curent, $\infty\infty m$) operația de inversie a timpului, *1'*, și toate combinațiile ei posibile cu rotațiile proprii și cu rotațiile de inversie se obține *grupul ortogonal extins*, $\infty\infty\bar{1}1'$. Legile fundamentale ale fizicii sînt invariante față de acest grup. Acestea sînt invariante și față de transporturi (translații). Toate combinațiile posibile ale transporturilor cu operațiile grupului ortogonal extins constituie în ansamblul lor *grupul euclidian extins*.

Toate transformările de simetrie ale unui cristal, luate în ansamblu, formează grupul de simetrie al cristalului. Dacă el cuprinde numai transformările care lasă invariante legile fizicii, este firesc să fie denumit *grupul simetriei fizice* a cristalului. Toate grupurile cristalografice punctuale și spațiale precum și toate subgrupurile cristalografice ale grupurilor euclidiene extinse și ortogonale extinse sînt grupuri de acest fel.

Să trecem acum la ideea de antisimetrie. Prima dintre simetrii este generalizarea noțiunii de egalitate : pe lîngă figurile egale se studiază și figurile *antiegale*. Cel mai simplu exemplu de figuri antiegale îl constituie două figuri geometric egale, însă colorate invers: o figură neagră este antiegală aceleiași figuri albe, iar cea albă celei negre. Astfel în schița lui Escher „Ziua și noaptea" (fig. 67.1) orașul în negru (noaptea) este antiegal cu orașul în alb (ziua), rîul în negru, rîului în alb, păsările în negru, păsărilor în alb.

În general pot fi considerate egale, după cum arată Șubnikov, figurile de aceleași dimensiuni, care sînt contrare una față de alta, în raport cu o anumită caracteristică : culoarea, semnul sarcinii electrice, sensul momentului magnetic etc. Prin urmare, culoarea albă sau neagră a unei figuri nu este altceva decît exprimarea convențională a faptului că, în afară de proprietățile geometrice, această figură mai are și o altă proprietate oarecare, proprietate ce poate fi exprimată printr-o mărime care poate lua doar două valori, să zicem +1 și −1. În cadrul simetriei pot fi analizate și acele proprietăți definite printr-o mărime care poate lua trei valori : +1, −1 și 0. Aceasta corespunde în a lua în considerație, în afară de figurile albe sau negre și figurile cenușii, ori alături

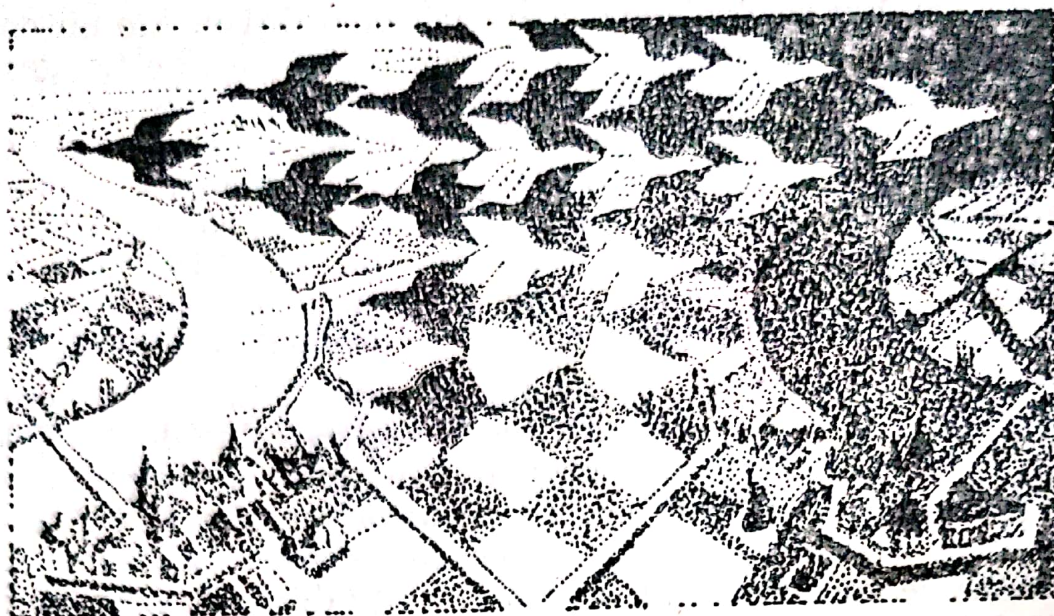


Fig. 67.1. Escher — „Noapte și zi”.

de corpurile încărcate pozitiv sau negativ, și corpurile lipsite de sarcină electrică, neutre.

Pe lîngă operațiile de simetrie se introduc *operațiile de antisimetrie*. În timp ce o operație de simetrie transformă o figură într-una la fel, adică într-o figură egală, operația de antisimetrie o transformă într-o figură antiegală. Prin urmare, se poate defini *operația de antiidentificare* și toate combinațiile sale posibile cu transformările ortogonale.

Operația de antiidentificare, *1'* (Șubnikov utilizează pentru această operație simbolul $\underline{1}$, însă sistemul de notații utilizat de el este în general diferit de cel internațional), aplicată în cazul figurilor albe-negre, constă în recolorare : tot ce pînă la această operație era colorat în alb, după aceasta devine negru, pe cînd tot ce era negru devine alb. Dacă imaginăm figurile nu colorate, ci încărcate electric, efectul aplicării operației de antiidentitate constă în inversarea semnului sarcinii.

Evident nu există vreo figură albă sau vreo figură neagră care să poată fi invariante față de operația de antiidentificare. Din această cauză, pe lîngă figurile negre și figurile albe se introduc și figurile cenușii, care, prin definiție, se transformă în ele însele ca urmare a antiidentificării. Dacă se admite interpretarea „electrică” a antiidentificării, adică dacă se consideră că antiidentificarea transformă un corp în el însuși, dar cu semnul schimbat, este clar că sînt invariante față de antiidentificare toate corpurile neîncărcate, electric neutre.

Combinațiile antiidentificării cu rotațiile simple și cu rotațiile cu oglindire se numesc *antirotații* și se notează cu simbolurile cores-

punzătoare rotațiilor, scrise cu semnul „prim" (după Şubnikov, cu minus sub semnul rotației). Antirotația este transformarea care constă dintr-o rotație și o recolorare; nu contează ordinea în care se fac operațiile.

Se numesc *grupuri punctuale de antisimetrie* (în sensul larg al cuvîntului) grupul format din toate rotațiile și antirotațiile simple și cu oglindire posibile și toate subgrupurile lui. Dintre acestea din urmă fac parte și grupurile de simetrie normale, G; în compunerea lor intră numai rotațiile obișnuite — simple și cu oglindire. Aceste grupuri se reprezintă numai prin figuri monocromatice, sau, cum se exprimă Şubnikov, prin figuri *polare* (de obicei, ele sînt desenate în culoare albă, dar la fel de bine ar putea fi colorate și în negru). Grupurile care conțin operația de antiidentificare „în ele însele" se notează cu $G1'$, fiindcă se reprezintă la fel cu G, dar cu desene cenușii; pe aceste figuri Şubnikov le numește figuri *neutre*. În sfîrșit, grupurile cu adevărat noi, adică grupurile G', care cuprind în structura lor antirotații, însă care nu conțin antiidentificări, sînt reprezentate prin figuri care au atît părți albe cît și părți negre; acestea sînt figurile cu *polaritate mixtă*. Aceste denumiri se extind și la grupuri: G — grupuri polare, sau grupuri albe; $G1'$ — grupuri neutre sau grupuri cenușii; G' — grupuri de polaritate mixtă, sau grupurile alb-negre. Menționăm că sub denumirea de grupuri de antisimetrie se înțeleg adesea numai grupurile de polaritate mixtă. Unele imagini ce ilustrează cîteva dintre aceste grupuri sînt date în figura 67.2.

Cînd Tavgher și Zaițev (1956), urmărind ideile expuse în „Fizica statistică", au dedus grupurile punctuale ale simetriei magnetice a cristalelor, s-a constatat că ele sînt izomorfe grupurilor punctuale de antisimetrie, descrise în cartea lui Şubnikov. Așadar, grupurile de simetrie magnetică ale cristalelor se deosebesc numai ca interpretare de grupurile de antisimetrie. Mai exact, dintre numeroasele interpretări posibile ale grupurilor punctuale de antisimetrie, este posibilă și interpretarea lor ca grupuri de simetrie magnetică; tocmai această interpretare ne duce la grupurile de simetrie fizică a cristalelor. Avînd în vedere această interpretare, am notat operația de antiidentificare cu același simbol, $1'$, ca și inversia timpului.

După ce Şubnikov a emis ideea că este posibil și, mai mult decît atît, necesar să se generalizeze teoria clasică a simetriei, a făcut el însuși primii pași în acest sens, prin construirea grupurilor punctuale de antisimetrie; aceste cercetări au interesat un mare număr de cercetători. Curînd după aceea au fost definite grupurile spațiale de antisimetrie (Zamorzaev, 1953, 1957; Belov, Neronova, Smirnova, 1955, 1957) propunîndu-se generalizarea în continuare a simetriei clasice — simetria cromatică (Belov și

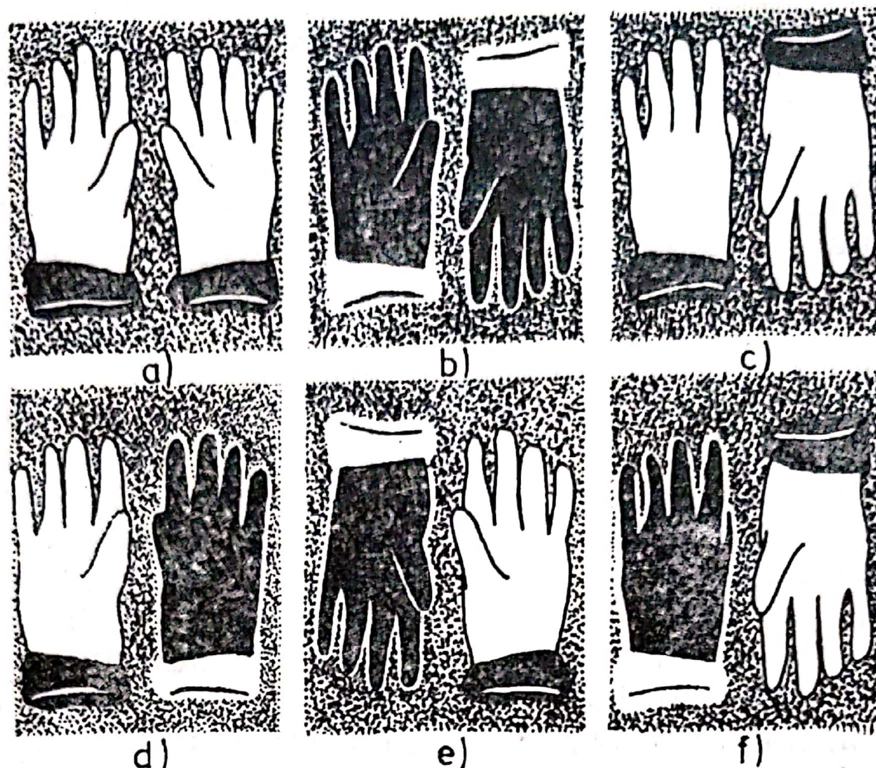


Fig. 67.2. Cele mai simple figuri simetrice (a, b, c) și antisimetrice (d, e, f), după Șubnikov. Simetria figurilor : a) plan de simetrie, m ; b) axă de simetrie 2 ; c) centru de simetrie, $\bar{1}$; d) plan de antisimetrie m' ; e) axă de antisimetrie, $2'$; f) centru de antisimetrie, $1'$.

Tarhova, 1956 ; Indenbom, Belov, Neronova, 1960 ; Zamorzaev, 1967, 1970). Multitudinea de generalizări ale teoriei clasice poate fi supusă unor clasificări și dedusă plecînd de la o poziție unică, prin aplicarea metodelor teoriei extinderii grupurilor (Șubnikov și Kopțik, 1972).

§ 68. GRUPURILE PUNCTUALE ALE SIMETRIEI MAGNETICE

Se numesc grupuri punctuale de simetrie magnetică grupul ortogonal extins și toate subgrupurile lui. Un grup ortogonal extins constă din toate transformările ortogonale posibile, g, precum și din aceste transformări, înmulțite cu inversia timpului ; le vom nota cu g'. Din faptul că inversia timpului comută cu toate transformările ortogonale, pătratul ei fiind transformarea identică, rezultă următoarele reguli ale înmulțirii :
dacă

$$g_i g_j = g_k, \qquad g_j g_i = g_l,$$

atunci

$$g_i g_j = g'_k, \qquad g_j g'_i = g'_l,$$

$$g_i g'_j = g'_k, \qquad g'_j g_i = g'_l, \tag{68.1}$$

$$g'_i g'_j = g_k, \qquad g'_j g'_i = g_l.$$

Vom examina grupurile cristalografice (adică cele ce conţin rotaţiile şi antirotaţiile numai cu unghiurile $\pi/2$, $\pi/3$ şi multiplii lor) şi grupurile limită ale simetriei magnetice. Uneori, sînt numite şi *clase de simetrie magnetică.*

Desigur, ele vor cuprinde, în primul rînd, cele 32 grupuri cristalografice obişnuite şi cele 7 grupuri limită. Aceste grupuri pot fi considerate grupuri de simetrie magnetică, care nu conţin nici un fel de antirotaţii, inclusiv inversia timpului. Ele sînt grupurile albe sau polare, G.

Apoi, în cadrul grupurilor punctuale ale simetriei magnetice intră 39 de grupuri cenuşii (neutre), $G1'$: 32 de grupuri cristalografice şi 7 limită. Fiecare dintre ele conţine inversia timpului, iar orice rotaţie g intră în grup împreună cu antirotaţia corespunzătoare, g'.

În fine, cel de al treilea grup al simetriei magnetice este format de grupurile alb-negre, sau grupurile de polaritate mixtă, G'. Inversia timpului nu este cuprinsă în nici una dintre ele, însă împreună cu rotaţiile proprii ori rotaţiile cu inversie, $h_1, \ldots, h_k$, ele conţin obligatoriu şi antirotaţiile, $g'_1, \ldots, g'_l$. Deoarece în grup nu intră $1'$, nici una dintre operaţiile g_j nu coincide cu nici una dintre operaţiile h_i. Rotaţiile h_i constituie grupul H, care este un subgrup cristalografic (adică nemagnetic) al grupului G', iar antirotaţiile formează mulţimea $G' - H$.

Luînd o anumită antirotaţie dată, g'_j, să examinăm toate produsele posibile, $g'_j h_i$, în care h_i parcurge întregul grup H. Toate aceste produse sînt diferite, iar în virtutea relaţiei (68.1) aparţin mulţimii $G' - H$. Din această cauză, numărul elementelor din această mulţime nu este mai mare decît cel din grupa H. Pe de altă parte, analizînd toate produsele $g'_j g'_i$ posibile, pentru un g'_j dat cînd elementele g'_i parcurg toată mulţimea $G' - H$, găsim că şi acestea sînt toate diferite, iar în virtutea expresiei (68.1), aparţin grupului H, astfel încît numărul de elemente din el nu este mai mic decît în $G' - H$. Este cît se poate de clar că aceste numere sînt pur şi simplu egale, iar H este un subgrup al grupului G', de indice 2.

Omiţînd accentele elementelor g', din orice grup alb-negru se poate obţine grupul G' al grupului cristalografic $G = \{h_1, \ldots,$

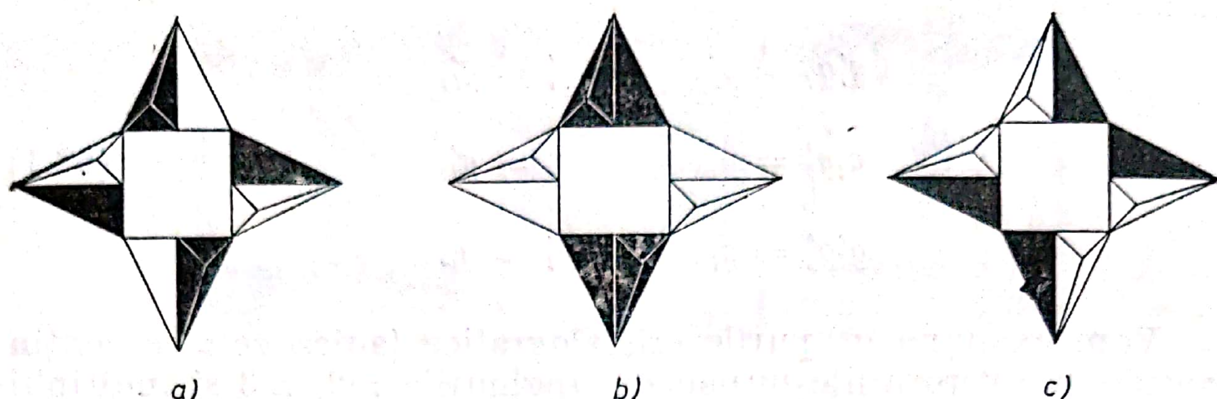


Fig. 68.1. Figuri din tetraedre albe și negre care aparțin grupurilor punctuale de antisimetrie legate de grupul cristalografic $G = \bar{4}2m$: a) $G' = 42'm'$; b) $G' = 4'2m'$; c) $G' = \bar{4}'2'm$.

$h_k, g_1, \ldots, g_k\}$. Și invers, din orice grup cristalografic G, din care face parte subgrupul H, de indice 2, se poate obține grupul alb-negru, G', înmulțind elementele g_j, care nu intră în subgrupul H, cu inversia timpului. Ansamblul rotațiilor, h_i, și antirotațiilor, g'_j, formează grupul alb-negru căutat, G'; cu această metodă se pot obține toate grupurile de acest fel.

Să deducem, de exemplu, care grupuri alb-negre se pot obține din grupul $\bar{4}2m$. Acest grup este un grup de ordinul opt. El are trei subgrupuri cu indicele 2, și anume, 222 și $mm2$. Să le examinăm pe rînd. Dintre elementele subgrupului $\bar{4}2m$

intră în subgrupul $\bar{4}$: $1,\ 2_z,\ \bar{4}_z,\ \bar{4}^3_z$;
nu intră în subgrupul $\bar{4}$: $2_x,\ 2_y,\ m_u,\ m_v$;
intră în subgrupul 222: $1,\ 2_z,\ 2_x,\ 2_y$;
nu intră în subgrupul 222: $\bar{4}_z,\ \bar{4}^3_z,\ m_u,\ m_v$;
intră în subgrupul $mm2$: $1,\ 2_z,\ m_u,\ m_v$;
nu intră în subgrupul $mm2$: $2_x,\ 2_y,\ \bar{4}_z,\ \bar{4}^3_z$.

Înlocuind transformările ortogonale corespunzătoare rotațiilor, care nu intră în subgrupul H, vom ajunge la următoarele trei grupuri alb-negre

$$\{1,\ 2_z,\ \bar{4}_z,\ \bar{4}^3_z,\ 2'_x,\ 2'_y,\ m'_u,\ m'_v\} = \bar{4}2'm';$$

$$\{1,\ 2_z,\ 2_x,\ 2_y,\ \bar{4}'_z,\ \bar{4}^{3\prime}_z,\ m'_u,\ m'_v\} = \bar{4}'2m';$$

$$\{1,\ 2_z,\ m_u,\ m_v,\ 2'_x,\ 2'_y,\ \bar{4}'_z,\ \bar{4}^{3\prime}_z\} = \bar{4}'2'm;$$

ele sînt reprezentate în figura 68.1.

Celelalte grupuri cristalografice alb-negre se obțin ușor prin aceeași metodă (v., de exemplu, fig. 68.2).

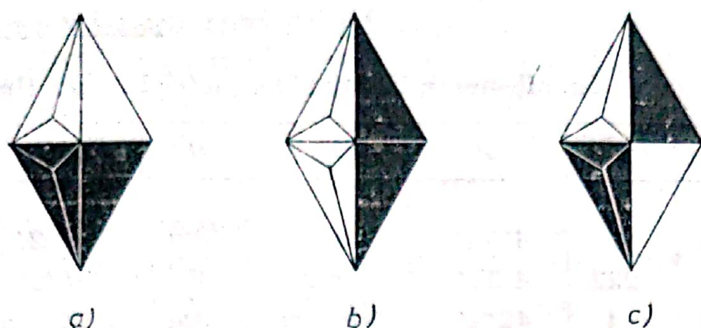


Fig. 68.2. Figuri de tetraedre albe şi negre, care aparţin grupurilor punctuale de antisimetrie legate de grupul cristalografic $G = 2/m$: a) $G' = 2/m'$; b) $g' = 2'/m$; c) $G' = 2'/m'$.

În tabelul 68.1 sînt enumerate toate grupurile cristalografice şi grupurile limită*, G, subgrupurile lor, H, de indice 2, şi grupurile alb-negre corespunzătoare, G'. Calculul arată că există 58 de grupuri alb-negre cristalografice şi 7 grupuri alb-negre limită. Dar în total, numărul de grupuri punctuale ale simetriei magnetice de diferite tipuri este de 143 : 122 grupuri cristalografice şi 21 grupuri limită.

Notaţiile internaţionale ale grupurilor cristalografice ale simetriei magnetice sînt definite prin următoarele reguli :

1) grupul polar (alb), G, se notează exact la fel cu grupul cristalografic format din aceleaşi transformări ;

2) grupul neutru (cenuşiu), $G1'$, se notează cu simbolul care corespunde grupului cristalografic G, cu adăugarea lui $1'$; de exemplu, $321'$, $m3m1'$; faptul că grupul este neutru este desemnat şi prin existenţa în simbol a semnului $3'$; astfel, în loc de $321'$ şi $m3m1'$ se poate scrie $3'2$ şi, respectiv, $m3'm$;

3) notarea unui grup de polaritate mixtă (grup alb-negru), G', se deosebeşte de notaţia internaţională care corespunde grupului cristalografic G numai prin faptul că operaţiile menţionate în el se notează cu semnul prim; de exemplu, $m'3m$ înseamnă că inversia timpului este însoţită de reflexia în planurile {100}, $m3m'$, în planurile {110}, iar $m'3m'$, în unele sau în altele**.

Grupurile cristalografice ale simetriei magnetice se utilizează pentru exprimarea simetriei cristalelor ţinînd seama de ordonarea magnetică a structurii lor, pe cînd grupurile limită pot fi folosite,

* Cea mai simplă deducere a grupurilor alb-negre se bazează pe următoarea teoremă : dacă grupul punctual G are o reprezentare cu semne contrare (adică o reprezentare care constă din cifrele 1 şi —1), atunci se poate construi grupul alb-negru, G', păstrînd neschimbate acele elemente ale grupului G, cărora, în această reprezentare cu semne contrare, le corespunde 1, pe celelalte înmulţindu-le cu inversia timpului (Indenbom, 1969).

** Alături de notaţiile internaţionale ale grupurilor punctuale ale simetriei magnetice, se utilizează şi notaţiile Şubnikov. Ele se obţin din notaţiile Şubnikov ale grupurilor cristalografice aproape cu ajutorul aceloraşi reguli. Singura deosebire constă în faptul că în loc de semnul prim se utilizează semnul minus sub simbolul respectiv ; de exemplu, grupurile $\bar{4}2'm'$, $\bar{4}'2m'$ şi $\bar{4}'2'm$, conform notaţiilor Şubnikov, sînt $\bar{4} : \underline{2}$, $4 : \underline{2}$ şi, respectiv, $\bar{4} : \underline{2}$.

Tabelul 68.1

Grupurile alb-negre cristalografice și grupurile alb-negre limită ale simetriei magnetice

G	H	G′	G	H	G′	G	H	G′
1	—	—	4/m	$\bar{4}$	4′/m′	6m2	3m	$\bar{6}'m2'$
$\bar{1}$	1	$\bar{1}'$	422	222	4′22′	$\bar{6}m2$	$\bar{6}$	$\bar{6}m'2'$
2	1	2′	422	4	42′2′	6/mmm	$\bar{3}m$	6′/m′mm′
m	1	m′	4mm	mm2	4′mm′	6/mmm	6/m	6/mm′m′
2/m	$\bar{1}$	2′/m′	4mm	4	4m′m′	6/mmm	622	6/m′m′m′
2/m	2	2/m′	$\bar{4}2m$	222	$\bar{4}'2m'$	6/mmm	6mm	6/m′mm
2/m	m	2′/m	$\bar{4}2m$	mm2	$\bar{4}'2'm$	6/mmm	$\bar{6}m2$	6′/mmm′
222	2	22′2′	$\bar{4}2m$	$\bar{4}$	$\bar{4}2'm'$	23	—	—
mm2	2	m′m′2	4/mmm	mmm	4′/mmm′	m3	23	m′3
mm2	m	mm′2′	4/mmm	4/m	4/mm′m′	432	23	4′32′
mmm	2/m	mm′m′	4/mmm	422	4/m′m′m′	$\bar{4}3m$	23	$\bar{4}'/3m'$
mmm	222	m′m′m′	4/mmm	4mm	4/m′mm	m3m	m3	m3m′
mmm	mm2	mmm′	4/mmm	$\bar{4}2m$	4′/m′m′m	m3m	432	m′3m′
3	—	—	6	3	6′	m3m	$\bar{4}3m$	m′3m
$\bar{3}$	3	$\bar{3}'$	$\bar{6}$	3	$\bar{6}'$	∞	—	—
32	3	32′	6/m	$\bar{3}$	6′/m′	∞/m	∞	∞/m′
3m	3	3m′	6/m	6	6/m′	∞2	∞	∞2′
$\bar{3}m$	$\bar{3}$	$\bar{3}m'$	6/m	$\bar{6}$	6′/m	∞m	∞	∞m′
$\bar{3}m$	32	$\bar{3}'m'$	622	32	6′22′	∞/mm	∞/m	∞/mm′
$\bar{3}m$	3m	$\bar{3}'/m$	622	6	62′2′	∞/mm	∞2	∞/m′m′
4	2	4′	6mm	3m	6′mm′	∞/mm	∞m	∞/m′m
$\bar{4}$	2	$\bar{4}'$	6mm	6	6m′m′	∞∞	—	—
4/m	2/m	$\bar{4}'/m$	$\bar{6}m2$	32	$\bar{6}'m'2$	∞∞m	∞∞	∞∞m′
4/m	4	4/m′						

în particular, pentru caracterizarea simetriei mărimilor care figurează în sistemul de ecuații Maxwell.

Sarcina electrică, *e*. Aceasta este un scalar, care nu-și schimbă semnul la inversia timpului. Așadar, acest scalar va fi invariant la toate transformările grupului ortogonal extins $\infty\infty\bar{1}1'$, care tocmai din această cauză, trebuie considerat, de fapt, grupul lui de simetrie. Aceeași este, firește, și simetria masei, *m*.

Intensitatea cîmpului electric, ***E***. Acesta este un vector polar, care nu-și modifică sensul la inversia timpului. Grupul lui de simetrie magnetică include grupul de simetrie al unui vector polar, ∞*m*, și grupul 1′, acesta fiind grupul limită ∞*m*1′. Aceeași simetrie ca vectorul ***E*** o are și raza vectoare ***r***.

Intensitatea cîmpului magnetic, ***H***. Acesta este un vector axial, care, la inversia timpului își inversează sensul. Și reflexia pe un plan paralel cu axa principală inversează, de asemenea, sensul unui vector axial. Desigur, compunerea unei asemenea

oglindiri cu inversia timpului nu va modifica sensul vectorului $\boldsymbol{H}$, fiind, deci, un element de simetrie pentru acest vector. Din această cauză, grupul de simetrie al vectorului intensitate a cîmpului magnetic conţine ca subgrup grupul de simetrie al vectorului axial ∞/m precum şi grupul m' (acest plan fiind paralel cu axa ∞). Un asemenea grup limită este ∞/mm'.

Ca exerciţiu, să determinăm care ar fi simetria *sarcinii magnetice*, dacă o asemenea sarcină ar putea, în general, exista. Aceasta ar fi un pseudoscalar, care şi-ar schimba semnul la inversia timpului. Desigur, faţă de inversia spaţio-temporală (antiinversia) mărimea aceasta trebuie să fie invariantă. Din această cauză, simetria ei este $\infty\infty 1'$.

Grupurile punctuale ale simetriei magnetice a cristalelor, considerate ca grupuri de antisimetrie, pot fi folosite pentru definirea simetriei (mai exact a antisimetriei) tensorilor de material de tip impar (v. § 44). Folosirea lor se bazează pe următoarele consideraţii. Aplicarea inversiei tensorilor de tip impar are ca efect înmulţirea tuturor componentelor lor cu -1, această operaţie fiind normal să fie considerată drept o antiidentificare : $\bar{1} \to \to 1'$. Operaţia aceasta ca atare lipseşte, evident, din grupurile de antisimetrie ale tensorilor de tip impar, însă produsele sale cu operaţiile care intră în grupul de simetrie al tensorului definesc simetria acestuia.

Fie, de exemplu, ca printre elementele de simetrie ale unui tensor de tip impar să intre planul de simetrie m. Deoarece $m = = 2 \cdot \bar{1}$, iar $\bar{1} \to 1'$, atunci $m \to 2 \cdot 1' = 2'$, adică din faptul că printre elementele de simetrie ale unui tensor de tip impar există un plan de simetrie, rezultă că el va avea şi o axă de antisimetrie de ordinul doi, perpendiculară pe acest plan. Aceasta înseamnă că în cazul rotaţiei unui tensor (sau a sistemului de coordonate) cu 180° în jurul direcţiei perpendiculare la planul de simetrie, toate componentele lui îşi modifică semnul. Şi într-adevăr, una dintre proiecţiile stereografice ale suprafeţei efectului piezoelectric longitudinal în cristalul de turmalină (clasa $3m$), reprezentate în figura 44.2, este astfel construită, încît planul proiecţiei X_2X_3 coincide cu unul dintre planurile de simetrie ale cristalului. Axa perpendiculară la acest plan, X_1, trebuie deci să fie antiaxă de ordinul doi : $2' \| X_1$, iar faptul că este într-adevăr aşa se vede foarte clar din proiecţie.

Un alt exemplu : fie ca un tensor de tip impar să aibă axa de simetrie de ordinul doi, 2. Deoarece $2 = m \cdot \bar{1}$, rezultă $2 \to m'$, adică din existenţa în cazul unui tensor de tip impar a unei axe de simetrie de ordinul doi rezultă existenţa la el şi a unui plan de antisimetrie perpendicular pe axă. Aceasta se vede din figurile 58.2 şi 58.3, în care sînt date proiecţiile stereografice ale supra-

fețelor efectului piezoelectric longitudinal din cristalele de etilendiamintartrat și sulfat de litiu (clasa 2). Axa $2 \parallel X_2$ nu se observă în aceste figuri (ea permite să ne mărginim numai la un singur cerc anterior al proiecțiilor), pe cînd planul de antisimetrie, $m' \perp X_2$, perpendicular la acea axă, nu se vede foarte clar.

Deoarece într-un grup de antisimetrie împreună cu un plan de simetrie intră și o antiaxă de ordinul doi, perpendiculară pe plan, iar împreună cu o axă de ordinul doi, un antiplan perpendicular la axă, în grupul de antisimetrie trebuie să intre și produsul acestor elemente — anticentrul de simetrie (sau centrul de antisimetrie), $\bar{1}'$. El intră în grupul de antisimetrie al oricărui tensor de tip impar: într-adevăr, dacă un tensor se înmulțește cu -1, atît în cazul inversiei $\bar{1}$ cît și al antiidentificării, $1'$, el va fi invariant față de produsul acestor două operații, $\bar{1}'$. Prin urmare, în timp ce tensorii de tip par au centru de simetrie, tensorii de tip impar au un centru de antisimetrie.

Acest fapt facilitează aflarea grupurilor de antisimetrie, $G'(\mathbf{T})$, ale tensorilor de tip impar, $\mathbf{T}$: pentru a construi grupul $G'(\mathbf{T})$ este suficient să se adauge grupului de simetrie $G(\mathbf{T})$ un centru de antisimetrie, $\bar{1}'$, și produsele grupului cu toți $g \in G(\mathbf{T})$. Evident, toate grupurile $G'(\mathbf{T})$, obținute în acest fel, sînt alb-negre.

Grupurile limită de antisimetrie se construiesc analog. Astfel, grupul de simetrie al vectorului $G(\boldsymbol{V})$ este $G(\boldsymbol{V}) = \infty m$; grupul său de antisimetrie, $G'(\boldsymbol{V}) = \infty/m'm$, se vede clar în figura 22.3, în care este reprezentată suprafața sa. Grupul de simetrie al unui tensor de rangul trei, $\mathbf{e}$, antisimetric în raport cu toți indicii, (v. § 42) este $G(\mathbf{e}) = \infty\infty$, iar grupul lui de antisimetrie este $G'(\mathbf{e}) = \infty\infty m'$.

În tabelul 68.2 sînt date grupurile de antisimetrie G' pentru orice tensor de tip impar, al cărui grup de simetrie este G.

Tabelul 68.2

Grupurile de antisimetrie ale tensorilor de tip impar (G — grupul de simetrie, G' — grupul de antisimetrie)

G	G'	G	G'	G	G'
1	$\bar{1}'$	$\bar{4}$	$4'/m'$	23	$m'3$
2	$2/m'$	422	$4'/m'm'm'$	432	$m'3m'$
m	$2'/m$	$4mm$	$4/m'mm$	$\bar{4}3m$	$m'3m$
222	$m'm'm'$	$\bar{4}2m$	$4/m'm'm$	∞	∞/m'
$mm2$	mmm'	6	$6/m'$	$\infty 2$	$\infty/m'm'$
3	$\bar{3}'$	$\bar{6}$	$6'/m$	∞m	$\infty/m'm$
32	$\bar{3}'m'$	622	$6/m'm'm'$	$\infty\infty$	$\infty\infty m'$
$3m$	$\bar{3}'m$	$6mm$	$6/m'mm$		
4	$4/m'$	$\bar{6}m2$	$6'/mmm'$		

§ 69. GRUPURILE SPAȚIALE ALE SIMETRIEI MAGNETICE — GRUPURILE ȘUBNIKOV

Grupurile spațiale ale simetriei magnetice, denumite, în cinstea lui Șubnikov, întemeietorul teoriei antisimetriei, *grupuri Șubnikov*, sînt subgrupuri discrete ale grupului euclidian extins. Grupurile Șubnikov nu sînt, prin urmare, decît o generalizare naturală a grupurilor Fiodorov, care reprezintă subgrupuri discrete ale grupului euclidian obișnuit.

Din grupurile Șubnikov fac parte, în primul rînd, toate acele transformări care intră în grupurile spațiale obișnuite : translațiile, rotațiile cu inversie și rotațiile elicoidale obișnuite, cu unghiuri de $\pi/2$, $\pi/3$ și multipli ai acestor valori, oglindirile și inversiile cu alunecare ; în al doilea rînd fac parte aceleași transformări, însoțite de inversia timpului : antitranslațiile, antirotațiile de inversie și elicoidale obișnuite, antireflexiile și antiinversiile cu oglindire și cu alunecare.

Exact cum fiecărui grup spațial îi corespunde un grup punctual și numai unul, care definește clasa cristalelor ce posedă grupul spațial dat, tot așa și fiecărui grup Șubnikov îi corespunde un singur grup punctual cristalografic al simetriei magnetice, și numai unul, care determină clasa simetriei magnetice a tuturor cristalelor ce au grupul Șubnikov dat. În transformările care intră în compunerea unui grup Șubnikov, înlocuind toate translațiile prin identificări, iar antitranslațiile prin antiidentificări, obținem grupul punctual al simetriei magnetice, care corespunde grupului Șubnikov considerat.

Fiecărei clase a simetriei magnetice îi corespunde, în general, cîteva grupuri Șubnikov ; în timp ce există ceva mai mult de o sută de clase ale simetriei magnetice, numărul grupurilor Șubnikov depășește o mie cinci sute.

Dintre grupurile Șubnikov fac parte mai întîi 230 grupuri spațiale (Fiodorov) obișnuite. Dacă acestea sînt interpretate drept grupuri Șubnikov, ele vor apărea ca operații care nu conțin nici un fel de antioperații, adică ca *grupuri albe* sau *polare* ; le vom nota cu simbolul Φ. Întrucît în compunerea acestor grupuri nu există nici un fel de antioperații, ele nu pot face parte nici din efectivul grupurilor punctuale ale simetriei magnetice, care corespund acestor grupuri Șubnikov. Așadar, celor 230 grupuri Șubnikov albe sau polare, Φ, le corespund 32 grupuri punctuale, albe, G.

Dintre grupurile Șubnikov fac parte apoi cele 230 grupuri în compunerea cărora, alături de fiecare operație intră și antioperația care-i corespunde : pe lîngă translații — antitranslațiile, pe lîngă rotații — antirotațiile de același gen și cu aceleași unghiuri etc. ; vom numi aceste grupuri *grupuri cenușii* sau *neutre* și le vom nota

cu $\Phi 1'$. Fiecăruia dintre grupurile Şubnikov neutre îi corespunde, evident, un anumit grup punctual neutru al simetriei magnetice, iar tuturor celor 230 grupuri Şubnikov neutre, $\Phi 1'$, le corespund 32 grupuri punctuale neutre ale simetriei magnetice, $G1'$.

În fine, pe lîngă cele 460 grupuri Şubnikov enumerate, care se deduc de fapt fără nici o demonstraţie, mai există şi grupurile Şubnikov Φ', de *polaritate mixtă*, sau *alb-negre*. În compunerea fiecăruia dintre ele, inversia timpului, ca atare, nu intră, însă intră obligatoriu unele antioperaţii. Aceste grupuri au fost deduse de Zamorzaev (1953, 1967) şi, independent de el, de Belov, Neronova şi Smirnova (1955, 1957). S-au găsit 1191 grupuri de acest fel.

În grupurile de acest tip operaţiile nu corespund niciodată unor antioperaţii : dacă într-un grup Φ' intră rotaţia cu un anumit unghi sau translaţia cu un anumit vector, atunci nici antirotaţia cu acelaşi unghi, nici antitranslaţia cu acelaşi vector nu pot face parte din grupul Φ'. Operaţiile obişnuite formează subgrupul Fiodorov, F, de indice 2 al grupului Şubnikov considerat, Φ'. Dacă toate antioperaţiile din grupul Φ' sînt înlocuite cu operaţiile obişnuite corespunzătoare, obţinem grupul Fiodorov, Φ ; în raport cu el, F este un subgrup de indice 2. Din această cauză, metoda deducerii grupurilor spaţiale alb-negre ale simetriei magnetice se deosebeşte, în principiu, de deducerea grupurilor punctuale alb-negre : trebuie examinate succesiv toate grupurile de indice 2 ale grupurilor Fiodorov, Φ. Păstrînd operaţiile care aparţin subgrupului F, fără modificări, înlocuim celelalte operaţii ale grupului Φ cu antioperaţiile corespunzătoare. Ansamblul operaţiilor şi antioperaţiilor obţinute astfel în final constituie grupul Şubnikov, Φ' ; în acest mod se deduc toate grupurile Şubnikov de polaritate mixtă.

Grupurile Şubnikov de polaritate mixtă se împart în două tipuri, dat fiind că subgrupurile de indice 2, din grupurile Fiodorov Φ pot fi, în general, tot de două tipuri. Fie G un grup punctual care corespunde grupului spaţial Φ. Grupului spaţial F îi pot corespunde fie (a) un grup punctual H, care în raport cu grupul punctual G este un subgrup de indice 2, fie (b) acelaşi grup punctual G, care corespunde şi grupului spaţial Φ (aceeaşi subîmpărţire a grupului F de indice 2 în două tipuri se poate defini şi altfel : subgrupul F al grupului Φ este de tipul (a) dacă subgrupul său al tranziţiilor coincide cu subgrupul translaţiilor grupului Φ, sau de tipul (b), în caz contrar ; v. Boyle şi Lawrenson, 1972).

Dacă subgrupul F este de tipul (a), atunci el are de două ori mai puţine elemente de rotaţie, în schimb, toate translaţiile care intră în grupul Φ intră şi în subgrupul său, F. Dacă subgrupul F este de tipul (b), atunci în componentele lui intră aceleaşi elemente de rotaţie ca şi în grupul Φ, însă în grupul F translaţiile sînt, într-o

primă aproximaţie, cam de două ori mai puţine decît în grupul Φ; aceasta înseamnă că volumul celulei elementare este în grupul F de două ori mai mare decît în grupul Φ.

Să trecem acum de la grupurile Fiodorov Φ (de comparat simbolul din doi termeni, Φ/F, introdus de Kopţik (1966) pentru grupul Şubnikov, Φ'), la grupurile Şubnikov alb-negre, Φ', corespunzătoare celor dintîi. Dacă subgrupul Fiodorov, F, al unui grup Şubnikov dat este de tipul (a), atunci grupului spaţial alb-negru Φ' îi corespunde grupul punctual alb-negru, G'. Într-adevăr, dacă grupul punctual G corespunde grupului Fiodorov, Φ, iar subgrupul lui, H, subgrupului Fiodorov, F, este clar că grupului Şubnikov, Φ', îi corespunde grupul punctual alb-negru, G', pentru care H reprezintă un subgrup cristalografic.

Dacă subgrupul Fiodorov, F, al grupului Φ' este de tipul (b), atunci grupului Şubnikov alb-negru, Φ', îi corespunde grupul punctual cenuşiu $G1'$. Într-adevăr, în acest caz subgrupul Fiodorov F al grupului Φ' nu conţine toate translaţiile care intră în grupul Φ', ceea ce înseamnă că grupul Şubnikov Φ' conţine antitranslaţia. Prin trecerea de la un grup spaţial la grupul punctual care îi corespunde, toate translaţiile sînt înlocuite cu identificarea, iar antitranslaţiile cu antiidentificarea; antiidentificarea este conţinută numai în grupurile cenuşii. Din această cauză, dacă unui grup Fiodorov, Φ, şi subgrupului său F de indice 2 îi corespunde

Tabelul 69.1

Numărul de grupuri Şubnikov de diferite tipuri

Grupurile Şubnikov	Grupurile punctuale corespunzătoare			Total
	32 albe (G)	32 cenuşii ($G1'$)	58 alb-negre (G')	
Albe (Φ)	230	—	—	230
Cenuşii ($\Phi1'$)	—	230	—	230
Alb-negre (Φ')	—	517	674	1191
Total	230	747	674	1651

unul şi acelaşi grup punctual G, atunci grupului Şubnikov Φ' îi corespunde grupul punctual $G1'$. În tabelul 69.1 este dat numărul de grupuri Şubnikov de diferite tipuri.

Pentru notarea grupurilor Şubnikov, în practică se utilizează sistemul modificat al notaţiilor internaţionale al grupurilor spaţiale, propus de Belov, Neronov şi Smirnov (v. articolul lor din 1955; scrierea tuturor grupurilor Şubnikov este dată şi în mono-

grafia lui V. A. Kopţik, 1966) ; sistemul lui A. M. Zamorzaev, după cît se pare, nu s-a răspîndit. Notaţiile internaţionale ale grupurilor Şubnikov se definesc cu ajutorul unor reguli care nu se deosebesc cu nimic de regulile analoage pentru grupurile punctuale ale simetriei magnetice. Singura completare este necesară pentru notarea acelor grupuri Şubnikov alb-negre, care corespund grupurilor punctuale cenuşii. În notaţiile acestor grupuri, simbolului reţelei Bravais i se ataşează un indice care să arate direcţia antitranslaţiei.

Litera mică din notarea indicelui arată că antitranslaţia este îndreptată după muchia corespunzătoare a celulei elementare, majusculele A, B sau C, că este orientată spre centrul feţei respective, iar majuscula I, că este orientată spre centrul celulei elementare.

Din notaţia internaţională a unui grup Şubnikov este uşor de determinat tipul lui şi grupul lui punctual de simetrie magnetică. Dacă notaţia grupului Şubnikov coincide cu notaţia unui grup Fiodorov oarecare (adică nu conţine nici semnul „prim" nici alt indice în simbolul reţelei), atunci grupul este unul dintre grupurile Şubnikov albe (polare). Dacă în simbolul grupului apare $1'$ sau $3'$, atunci grupul este un grup Şubnikov cenuşiu (neutru). Dacă în simbolul grupului intră alte elemente de simetrie cu semnul prim, înseamnă că avem de-a face cu unul dintre grupurile Şubnikov alb-negre, care fac parte din clasa de simetrie magnetică alb-neagră. În fine, indicele ataşat literei care desemnează tipul celulei Bravais permite includerea grupului considerat în unul dintre grupurile Şubnikov alb-negre, care intră în clasa de simetrie magnetică cenuşie (neutră).

Să examinăm un exemplu de deducere a grupurilor Şubnikov : să enumerăm toate grupurile Şubnikov, care pot fi deduse din grupul Fiodorov $P2$. Mai jos este extras setul de elemente ale grupului $\Phi = P2$ (strict vorbind, ele ar trebui notate $[h|\boldsymbol{t}]$, h fiind rotaţia, iar $\boldsymbol{t}$ translaţia, însă aici, operaţiile de tipul $[h|0]$ şi $[1|\boldsymbol{t}]$ se notează, pentru prescurtare, h şi, respectiv, $\boldsymbol{t}$), care conţin toate elementele generatoare ale subgrupului F de indice 2. În continuare este dată lista elementelor generatoare ale subgrupului F. Sub fiecare dintre aceste subgrupuri este scris grupul Şubnikov corespunzător, Φ' (cu ajutorul simbolului lui Kopţik, format din doi termeni, el se notează cu Φ/F). Antitranslaţiile sînt notate cu vectori ce au indicele prim.

$$P2 = \{1,\ 2_y,\ \boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}_2,\ \boldsymbol{a}_3,\ 2\boldsymbol{a}_1,\ 2\boldsymbol{a}_2,\ \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2,\ \ldots\}$$

$$P1 = \{1,\ \boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}_2,\ \boldsymbol{a}_3,\ 2\boldsymbol{a}_1,\ 2\boldsymbol{a}_2,\ \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2,\ \ldots\}$$

$$P2' = \{1,\ 2'_y,\ \boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}_2,\ \boldsymbol{a}_3,\ 2\boldsymbol{a}_1,\ 2\boldsymbol{a}_2,\ \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2,\ \ldots\}$$

$$P2 = \{1,\ 2_y,\ \qquad a_2,\ a_3,\ 2a_1,\ 2a_2,\ \ldots\ldots\ldots\ldots\}$$

$$P_a2 = \{1,\ 2_y,\ a'_1,\ a_2,\ a_3,\ 2a_1,\ 2a_2,\ a'_1 + a'_2,\ \ldots\}$$

$$P2 = \{1,\ 2_y,\ a_1,\ \qquad a_3,\ 2a_1,\ 2a_2,\ \ldots\ldots\ldots\ldots\}$$

$$P_b2 = \{1,\ 2_y,\ a_1,\ a'_2,\ a_3,\ 2a_1,\ 2a_2,\ a'_1 + a'_2,\ \ldots\}$$

$$C2 = \{1,\ 2_y,\ \qquad\qquad a_3,\ 2a_1,\ 2a_2,\ a_1 + a_2,\ \ldots\}$$

$$P_C2 = \{1,\ 2_y,\ a'_1,\ a'_2,\ a_3,\ 2a_1,\ 2a_2,\ a_1 + a_2,\ \ldots\ldots\}$$

Absența din acest tablou a grupului P_C2 se explică prin faptul că el se deosebește de P_a2 numai ca notație.

Grupurile punctuale și rețelele Bravais, obținute din grupurile Șubnikov, sînt următoarele :

Grupul Șubnikov	$P2'$	P_a2	P_b2	P_C2
Grupul punctual	$2'$	$21'$	$21'$	$21'$
Rețeaua Bravais	$P2/m$	P_a2/m	P_b2/m	P_C2/m

Prima dintre ele este de tipul (a), iar celelalte trei de tipul (b).

§ 70. SIMETRIA MAGNETICĂ A CRISTALELOR

Structura electrică și cea magnetică (v. Vonsovski, 1981) ale unui cristal pot fi descrise, după Landau și Lifșiț (1957, § 28), cu ajutorul a două funcții de coordonate : o funcție scalară $\rho(\boldsymbol{r})$, care descrie densitatea reală (microscopică) a sarcinii electrice, mediată în timp (însă nu și în raport cu volumul elementar) și o funcție vectorială, $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$, care descrie densitatea microscopică de curent, supusă aceleiași medieri. Prima dintre ele definește structura electrică a cristalului, iar cea de a doua, structura lui magnetică : dacă densitatea de sarcină, ρ, sau de curent, $\boldsymbol{j}$, nu sînt identic egale cu zero, se spune că cristalul are o structură electrică, respectiv, magnetică. În realitate, toate cristalele au structură electrică, pe cînd structură magnetică au relativ puține cristale.

Funcțiile $\rho(\boldsymbol{r})$ și $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$ trebuie să satisfacă anumite condiții. De exemplu, este evident că va fi satisfăcută condiția de neutralitate a fiecărei celule elementare în parte și, deci, și a cristalului ca un întreg

$$\int_V \rho \mathrm{d}V = 0 \qquad (70.1)$$

(aici şi în continuare integrala se extinde asupra celulei elementare; toate rezultatele sînt valabile şi pentru orice volum elementar pe care îl imaginăm compus din multe celule elementare întregi). Într-un cristal care se află în stare de echilibru, nu trebuie să existe nici curentul microscopic, adică

$$\int_V \boldsymbol{j} \, \mathrm{d}V = 0. \tag{70.2}$$

Momentul magnetic raportat la unitatea de volum,

$$\boldsymbol{m} = \frac{1}{V}\int_V \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{j} \mathrm{d}V, \tag{70.3}$$

poate totuşi fi diferit de zero şi atunci cristalul se numeşte cristal *feromagnetic*. Dacă însă densitatea curentului microscopic, $\boldsymbol{j}$, nu este identic egală cu zero şi totuşi $\boldsymbol{m} = 0$, atunci cristalul este *antiferomagnetic*. În acest din urmă caz, celula elementară poate fi împărţită în porţiuni ale căror momente magnetice să fie diferite de zero şi numai prin însumare să se anuleze.

Grupul G de simetrie microscopică al unui cristal este intersecţia (subgrupul comun cel mai mare) grupurilor de simetrie ale structurii electrice şi ale celei magnetice ale cristalului

$$G = G(\rho) \cap G(\boldsymbol{j}). \tag{70.4}$$

Grupul de simetrie al densităţii de sarcină electrică, $G(\rho)$ este pur şi simplu grupul Fiodorov, sau grupul spaţial Φ, al cristalului, completat cu inversia timpului, dat fiind că densitatea de sarcină electrică este invariantă faţă de inversia timpului: $G(\rho) = \Phi 1'$. Grupul de simetrie al densităţii de curent, $G(\boldsymbol{j})$ conţine inversia timpului, $1'$, numai în cazul în care $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) \equiv 0$, deoarece inversia timpului inversează sensul curentului. Dacă însă cristalul prezintă structură magnetică ($\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) \not\equiv 0$), atunci $G(\boldsymbol{j})$ este unul dintre grupurile Şubnikov albe sau alb-negre. De acelaşi tip este, în acest caz, şi grupul simetriei microscopice a cristalului, G.

Cristalele care nu au structură magnetică fac parte din unul dintre cele 230 de grupuri spaţiale cenuşii ale simetriei magnetice, $\Phi 1'$. Lor le corespund grupuri spaţiale cenuşii, $G1'$. Aşadar, grupurile punctuale ale simetriei magnetice a tuturor cristalelor care nu au structură magnetică sînt cenuşii. Reciproca nu este

însă adevărată: un cristal cu un grup punctual cenușiu poate avea un grup spațial alb-negru; în acest caz, cristalul are structură magnetică.

Trebuie să remarcăm că în cristalofizica magnetică grupul de simetrie al unui cristal nemagnetic obișnuit nu se notează ca în fizica clasică a cristalelor. Astfel, cristalele de sare gemă, care nu au structură magnetică, au simetria clasică $m3m$, cele de cuarț — 32, cele de dihidrofosfat de potasiu — $\bar{4}2m$. În cristalofizica magnetică grupurile punctuale de simetrie ale acestor cristale vor fi însă: $m3m1' = m3'm$, $321' = 3'2$ și, respectiv, $\bar{4}2m1'$. Dacă am nota însă simetria lor și în cristalofizica magnetică cu $m3m$, 32 și $\bar{4}2m$ am comite o eroare flagrantă: din aceste notații ar fi rezultat că aceste cristale au o structură magnetică.

Cristalele feromagnetice au, așa cum s-a remarcat, un moment magnetic, $\boldsymbol{m}$, diferit de zero. Vectorul moment magnetic, $\boldsymbol{m}$, este axial și își modifică direcția la inversia timpului. Rezultă deci că grupul lui de simetrie magnetică este ∞/mm'. Grupurile punctuale de simetrie ale cristalelor feromagnetice sînt subgrupuri ale următoarelor grupuri

$$1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 6,\ \bar{1},\ m,\ \bar{3},\ \bar{4},\ \bar{6},$$

$$2/m,\ 4/m,\ 6/m,\ 2',\ 22'2',\ 32',\ 42'2',$$

$$62'2',\ m',\ m'm'2,\ mm'2',\ 3m',\ 4m'm',$$

$$6m'm',\ \bar{3}m',\ \bar{4}2'm',\ \bar{6}m'2',\ 2'/m',$$

$$mm'm',\ 4/mm'm',\ 6/mm'm'.$$

În această listă sînt 31 de grupuri de simetrie magnetică. Dintre ele 13 sînt albe, 18 sînt alb-negre, neexistînd grupuri cenușii (v., de asemenea, Tavgher, 1958, și Șuvalov, 1959).

Celelalte 59 de grupuri punctuale albe și alb-negre ale simetriei magnetice este firesc să fie denumite grupuri punctuale antiferomagnetice. Cristalele cu grupuri punctuale antiferomagnetice se numesc cristale *antiferomagnetice de tipul I*. Totodată există și cristale *antiferomagnetice de tipul II*; acestea sînt cristale cu grupuri punctuale cenușii, dar fără grupuri spațiale alb-negre; ele se deosebesc substanțial din punct de vedere al proprietăților fizice de antiferomagneticele de tipul I (v. § 73).

În tabelul 70.1 este dată clasificarea cristalelor care nu au structură magnetică, în feromagnetice și antiferomagnetice de tipul I și de tipul II, în raport cu grupurile de simetrie magnetică. Din el rezultă, printre altele, că deosebirile dintre grupurile cenușii, pe de o parte, și grupurile albe și alb-negre, pe de alta, sînt

Tabelul 70.1

Clasificarea cristalelor care au proprietăți magnetice diferite, în funcție de simetria magnetică

Grupurile spațiale	Grupurile punctuale		
	90 de grupuri punctuale albe și alb-negre		32 de grupuri punctuale cenușii
	31 de grupuri feromagnetice	59 de grupuri antiferomagnetice	
1421 de grupuri albe și alb-negre	Feromagnetice (275 de grupuri Șubnikov)	Antiferomagnetice de tipul I (629 de grupuri Șubnikov)	Antiferomagnetice de tipul II (517 grupuri Șubnikov)
230 de grupuri cenușii	—	—	Cristale lipsite de structură magnetică (230 de grupuri Șubnikov)

esențiale din punct de vedere fizic. Diferența dintre grupurile albe și cele alb-negre, cu toate că este foarte importantă la deducerea acestor grupuri, nu are nici un sens fizic, după cum se vede (v. însă și § 76).

Simetria magnetică a unui cristal se stabilește cu ajutorul neutronografiei — a studiului difracției neutronilor lenți pe structura cristalină dată (v. Iziumov și Ozerov, 1966) : difracția neutronilor pe nuclee este determinată de grupul $G(\rho)$, iar difracția neutronilor pe momentele magnetice ale electronilor este determinată de grupul $G(\boldsymbol{j})$. Această metodă permite și punerea în evidență a distribuției spațiale a momentelor magnetice ordonate într-un cristal. Grupul Fiodorov al unui cristal se determină, de obicei, cu ajutorul studiului röntgenografic, complet insensibil la distribuția momentelor magnetice. Este important de lămurit care este raportul dintre grupurile spațiale deduse prin metode diferite.

Întrucît analiza röntgenografică nu este capabilă să deosebească antitranslația de translația obișnuită și antirotația de rotația obișnuită, ar părea evident că grupul Fiodorov al unui cristal cu structura magnetică, stabilită röntgenografic, se obține din grupul său Șubnikov, dacă înlocuim în acesta din urmă toate antitranslațiile prin translații obișnuite și toate antirotațiile prin rotații obișnuite. Am ajunge, deci, probabil la același grup Fiodorov din care este dedus grupul Șubnikov dat (v. § 69).

În practică însă rezolvarea acestei probleme se complică uneori foarte tare ; vinovată de aceasta este interacțiunea mag-

netică relativ slabă. Să examinăm un exemplu concret. Tranziţia feromagnetică în cristalele de fier (α —Fe) are loc la 1043 K; mai sus de această temperatură cristalele sînt paramagnetice, mai jos de ea sînt feromagnetice. Grupul Şubnikov al fazei paramagnetice este $Im3'm$, iar al celei feromagnetice $I4/mm'm'$. Analiza röntgenostructurală a unui cristal monodomenial ar trebui să ducă, conform celor spuse mai sus, la grupul Fiodorov $I4/mmm$. Însă o celulă cristalografică a unei faze feromagnetice, chiar dacă este, strict vorbind, o prismă tetragonală regulată, practic nu se deosebeşte de un cub: raportul dintre axe este $c/a = 1 + 3 \cdot 10^{-5}$. Din această cauză, datele röntgenostructurale conduc la grupul $G(\rho) = Im3'm$. Distribuţia momentelor magnetice dintr-o celulă cristalografică a unui cristal feromagnetic de fier este reprezentată în figura 70.1, grupul $G(j) = I4/mm'm'$; la fel este şi $G = G(\rho) \cap G(j)$. Grupul punctual al acestui cristal este $4/mm'm'$.

În figura 70.2 este reprezentată distribuţia momentelor magnetice într-un cristal de fluorură de mangan, MnF_2. O asemenea configuraţie a momentelor magnetice se caracterizează prin grupul Şubnikov, $G(j) = P_I 4mnc$; pe urmă, din datele analizei röntgenografice, $G(\rho) = P4/mnm1'$. Intersecţia acestor grupuri este grupul Şubnikov al fluorurii de mangan antiferomagnetice,

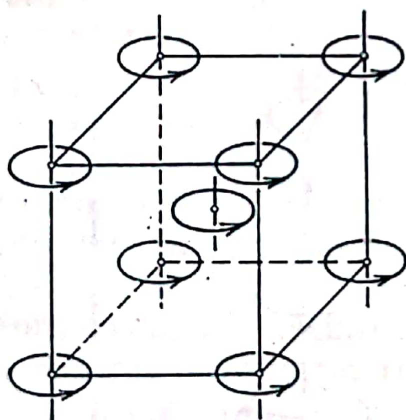


Fig. 70.1. Distribuţia momentelor magnetice într-un cristal feromagnetic de fier.

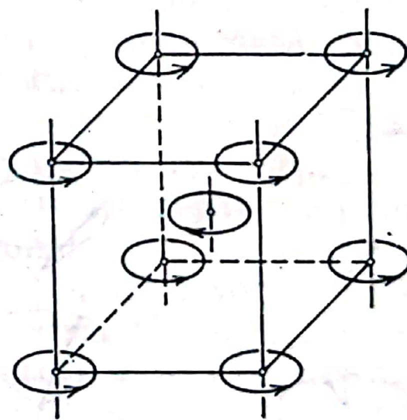


Fig. 70.2. Distribuţia momentelor magnetice într-un cristal feromagnetic de fluorură de mangan.

$P4'_2/mnm'$; grupul punctual al simetriei magnetice a acestui cristal este respectiv $4'/mmm'$. Proprietăţile lui fizice confirmă această concluzie (v. § 73).

Pe lîngă antiferomagnetici uniacşi se întîlnesc şi feromagnetici multiacşi; astfel, grupul Şubnikov al granatului de disproziu şi aluminiu, $Dy_3Al_5O_{12}$ este $Ia3d'$, grupul punctual al simetriei magnetice fiind $m3m'$.

Simetria antiferomagneticelor de tipul I, aşa cum s-a remarcat, nu se caracterizează numai prin grupurile spaţiale şi punctuale alb-negre, ci şi prin cele albe ale simetriei magnetice. De exemplu, un cristal antiferomagnetic de calcopirită, $CuFeS_2$, se caracterizează prin grupul Şubnikov $I\bar{4}2d$ (şi respectiv prin clasa de simetrie magnetică $\bar{4}2m$).

Drept exemplu de antiferomagnetice de tipul II se poate lua ilmenitul, $FeTiO_2$; grupul său Şubnikov este $R_I\bar{3}$, alb-negru, pe cînd clasa de simetrie magnetică este grupul $\bar{3}1'$, cenuşiu.

Cu ajutorul difracţiei neutronilor au fost descoperite şi structuri magnetice în care cu toate că aranjarea momentelor magnetice este ordonată, ea nu corespunde nici uneia dintre cele 1421 de grupuri Şubnikov albe şi alb-negre, aşa-numitele structuri elicoidale. Sînt cunoscute patru tipuri de astfel de structuri: spirala simplă, *SS*, spirala conică sau spirala feromagnetică, *FS*, spirala compusă, *CS*, şi, în fine, unda de spin longitudinală statică, *LSW*; ele sînt date în figura 70.3. Spirala simplă (*SS*) a fost descoperită, în particular, în holmiu şi în disproziu; spirala feromagnetică (*FS*) în holmiu şi erbiu; spirala compusă (*CS*) şi unda de spin longitudinală (*LSW*) tot în erbiu: în diferite intervale de temperatură se realizează diferite tipuri de ordonare magnetică. În timp ce simetria structurii electrice, $G(\rho)$, în cazul acestor

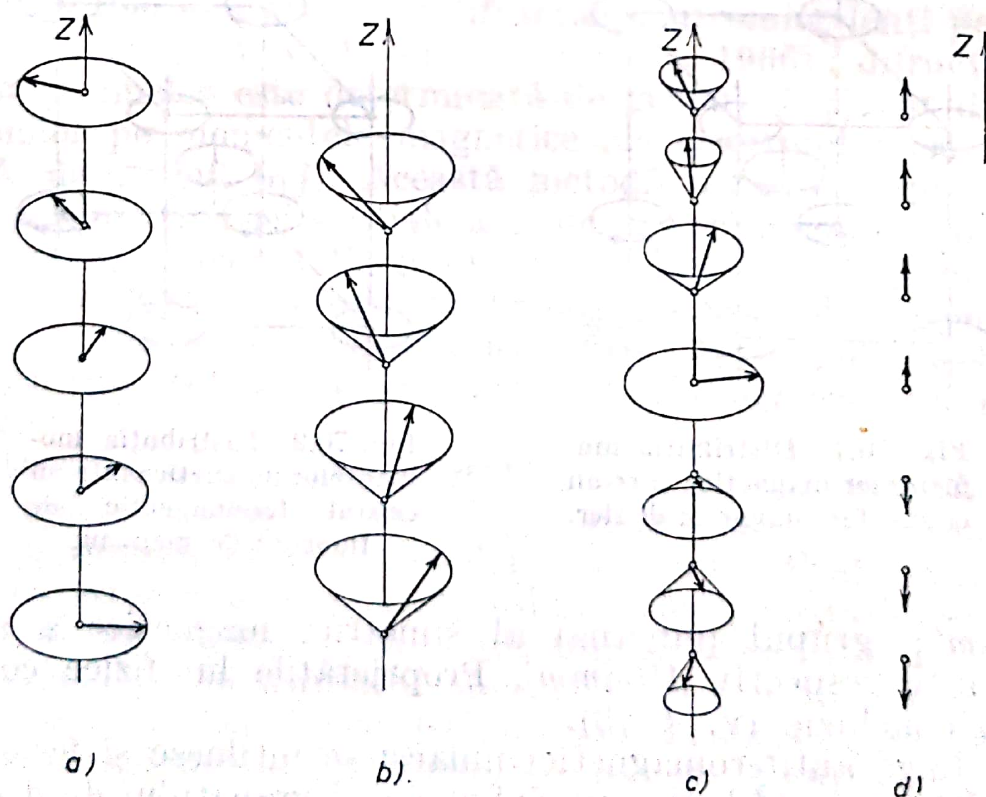


Fig. 70.3. Structuri elicoidale: *a*) spirală simplă; *b*) spirală feromagnetică; *c*) spirală compusă; *d*) undă de spin longitudinală statică.

cristale reprezintă pur şi simplu unul dintre grupurile Fiodorov (pentru multe dintre acestea el este grupul $P6_3/mmc$), la care se adaugă inversia timpului, grupul de simetrie al structurii lor magnetice, $G(\boldsymbol{j})$ este cu totul ieşit din comun. În planurile perpendiculare pe axa elicei grupul $G(\boldsymbol{j})$ conţine aceleaşi translaţii ca şi $G(\rho)$. Însă acea translaţie a grupului $G(\rho)$ care este orientată după axa elicei se combină în grupul $G(\boldsymbol{j})$ cu o rotaţie (*SS*, *FS* şi *CS*) sau cu schimbarea valorii momentului magnetic (*LSW*). Unghiul de rotaţie, legat de translaţia elementară, nu este pur şi simplu o parte a unei rotaţii complete, ci depinde şi de temperatură. Prin urmare, momentele magnetice ale atomilor în structurile elicoidale nu formează o reţea, cu toate că atomii respectivi constituie o reţea. Aceasta este, de asemenea, una dintre urmările interacţiunilor magnetice relativ slabe. Grupurile de simetrie care descriu asemenea structuri au fost deduse de Naiş (1963), iar mecanismul apariţiei lor a fost studiat de către Dzealoşinski (1964, 1964, a) de pe poziţia teoriei tranziţiilor de fază de speţa a doua, Landau.

71. REALIZAREA GEOMETRICĂ A UNUI GRUP ORTOGONAL EXTINS

Vectorii axiali sînt invarianţi la inversie, ceea ce înseamnă că şi baza vectorială axială, construită din ei, are această proprietate (v. § 23). În virtutea acestui fapt, tuturor transformărilor ortogonale ale unei baze vectoriale axiale îi corespund matricele ortogonale $\|\mathring{c}_{i'k}\|$, avînd determinantul pozitiv, $\det \|\mathring{c}_{i'k}\| = 1$. Matricele ortogonale al căror determinant este negativ nu corespund nici unui fel de transformări ortogonale.

Vom defini efectul aplicării operaţiei de inversie a timpului, $1'$, asupra vectorilor axiali astfel: inversia timpului, $1'$, schimbă în sens contrar circulaţia tuturor vectorilor axiali. Acestei transformări îi va corespunde matricea $\mathring{c}_{i'k}(1') = -\delta_{i'k}$. Datorită invarianţei vectorilor axiali faţă de inversie, acelaşi efect are asupra tuturor vectorilor axiali şi inversia spaţio-temporală (antiinversia), $\overline{1}'$, ei corespunzîndu-i exact aceeaşi matrice, $c_{i'k}(\overline{1}') = -\delta_{i'k}$. În general, tuturor operaţiilor care conţin inversia timpului — adică antioperaţiilor — le corespund matrice ortogonale $\|\mathring{c}_{i'k}\|$ cu determinantul $\det \|\mathring{c}_{i'k}\| = -1$.

Definiţia introdusă are un sens fizic evident: vectorii axiali definiţi în acest fel coincid din punct de vedere al proprietăţilor lor de transformare cu vectorul intensitate a cîmpului magnetic, $\boldsymbol{H}$, aceştia fiind, de asemenea, vectori axiali care-şi schimbă semnul la inversia timpului. Atunci este firesc ca proprietăţile de transformare ale vectorului intensitate a cîmpului electric,

$\boldsymbol{E}$, care nu își modifică direcția la inversia timpului, să fie atribuite vectorilor polari. Baza vectorială polară construită din vectorii polari este, de asemenea, invariantă față de inversia timpului. Din această cauză, pentru orice antirotații — simple sau de inversie — o bază vectorială polară se va transforma cu ajutorul aceleiași matrice ortogonale, $\|c_{i'k}\|$, ca și în cazul rotațiilor corespunzătoare.

În felul acesta, este definită legea de transformare a vectorilor bazei polare ($\boldsymbol{e}_i$) și axiale ($\mathring{\boldsymbol{e}}_i$) sub acțiunea oricărei operații g, care face parte dintr-un grup ortogonal extins, $\infty\infty\bar{1}1'$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{e}_{i'} &= c_{i'k}(g)\boldsymbol{e}_k, \\ \mathring{\boldsymbol{e}}_{i'} &= \mathring{c}_{i'k}(g)\mathring{\boldsymbol{e}}_k. \end{aligned} \tag{71.1}$$

În acest caz, fiecărei operații $g \in \infty\infty\bar{1}1'$ îi corespund două matrice egale sau care se deosebesc numai ca semn, $\|c_{i'k}(g)\|$ și $\|\mathring{c}_{i'k}(g)\|$. În grupul ortogonal extins intră operații de patru tipuri: rotații proprii, R, rotații cu inversie, $\bar{1}R$, antirotații, $1'R$, și antirotații de inversie, $\bar{1}'R$. Dacă unei rotații proprii, R, îi corespunde matricea $\|r_{i'k}\|$, atunci matricele $\|c_{i'k}(g)\|$ și $\|\mathring{c}_{i'k}(g)\|$ se definesc pentru orice operații ale grupului ortogonal extins cu ajutorul următorului tablou

g	R	$\bar{1}R$	$1'R$	$\bar{1}'R$
$c_{i'k}$	$r_{i'k}$	$-r_{i'k}$	$r_{i'k}$	$-r_{i'k}$
$\mathring{c}_{i'k}$	$r_{i'k}$	$r_{i'k}$	$-r_{i'k}$	$-r_{i'k}$.

Reunind baza polară cu baza vectorială, astfel încît să coincidă direcțiile vectorilor cu același indice, $\boldsymbol{e}_1$ cu $\mathring{\boldsymbol{e}}_1$, $\boldsymbol{e}_2$ cu $\mathring{\boldsymbol{e}}_2$, $\boldsymbol{e}_3$ cu $\mathring{\boldsymbol{e}}_3$, obținem o bază combinată. Matricea $\|c_{i'k}\|$ acționează asupra părții sale polare, iar $\|\mathring{c}_{i'k}\|$ asupra părții axiale. Operațiile R o rotesc ca pe un întreg, încît este suficient să se studieze acțiunea inversiei asupra ei.

Inversia spațială răstoarnă vectorii bazei polare, lăsîndu-i pe cei ai bazei axiale neschimbați. Ca urmare, tripletul polar dextrogir se transformă într-un triplet levogir, iar cel levogir, în unul dextrogir. Pe lîngă aceasta, denumirea șurubului, format prin compunerea unui vector polar cu unul axial, se modifică și ea în denumirea inversă. Din această cauză, baza combinată care

a fost acordată (neacordată) pînă la inversie rămîne la fel și după ea (de comparat cu § 23).

Inversia timpului, $1'$, dimpotrivă modifică sensul vectorilor bazei axiale în sens invers, nemodificînd sensul vectorilor polari.

Tabelul 71.1

Acțiunea inversiei asupra bazei vectoriale combinate

Baza vectorială combinată, inițială	Aceeași bază supusă la: inversia spațială	inversia temporală	inversia spațio-temporală
dextrogir acordat	levogir acordat	dextrogir neacordat	levogir neacordat
levogir acordat	dextrogir acordat	levogir neacordat	dextrogir neacordat
dextrogir neacordat	levogir neacordat	dextrogir acordat	levogir acordat
levogir neacordat	dextrogir neacordat	levogir acordat	dextrogir acordat

În acest caz, cei trei vectori polari își conservă denumirea, însă șuruburile formate prin combinarea unui vector polar cu unul axial își modifică denumirea în denumirea inversă; așadar, baza acordată se transformă în bază neacordată, iar baza neacordată, în bază acordată.

În sfîrșit, inversia spațio-temporală, *1'*, transformă în vectorii inverși atît sensul vectorilor polari, cît și sensul de rotație al vectorilor axiali. Din această cauză, cei trei vectori polari dextrogiri se transformă în vectori levogiri, iar cei trei vectori levogiri, în dextrogiri, însă denumirea elicei formată din compunerea unor vectori polari cu unii axiali nu se modifică. Ca urmare, baza acordată se transformă în bază neacordată, iar baza neacordată, în bază acordată.

În tabelul 71.1 este dată acțiunea inversiei asupra bazelor vectoriale combinate. Bazele se numesc în tabel dextrogiră sau levogiră după cum vectorii bazei polare formează un triplet dextrogir sau levogir. În bazele dextrogire acordate cei doi vectori polar și axial combinați (suprapuși) formează un șurub drept, iar în bazele levogire acordate un șurub stîng. Dimpotrivă, în bazele neacordate denumirea sensului șurubului este inversă denumirii bazei. Criteriul formal al acordării bazei este următorul: rotirea în jurul primului vector al bazei se efectuează dinspre vîrful pozitiv al celui de al doilea vector spre vîrful pozitiv al celui de al treilea; sensul de rotație în jurul celorlalți vectori ai bazei se deduce de aici prin intermediul permutărilor ciclice. În cazul bazelor neacordate, sensul de rotire este invers.

Tabelul 71.1 arată că operații diferite, aplicate unei baze date o vor transforma în baze diferite. Prin urmare, cunoscînd bazele combinate „veche" și „nouă", se poate afla complet univoc, prin intermediul cărei transformări anume a doua bază a fost obținută din prima.

§ 72. TENSORII DEFINIȚI PE GRUPUL ORTOGONAL EXTINS

Toți tensorii definiți pe grupul rotațiilor se transformă la fel, și anume,

$$A_{i'_1 \ldots i'_n} = r_{i'_1 k_1} \ldots r_{i'_n k_n} A_{k_1 \ldots k_n}. \tag{72.1}$$

Aici $\|r_{i'k}\|$ este matricea rotației $R(\mathring{\boldsymbol{k}}, \varphi)$ în jurul vectorului $\mathring{\boldsymbol{k}}$ cu unghiul φ. Însă tensorii definiți pe un grup ortogonal se împart în două tipuri. Tensorii de tip par se transformă în cadrul rotației

cu inversie, $\bar{1}R(\mathring{\boldsymbol{k}}, \varphi)$ a sistemului de coordonate după formula (72.1) pe cînd tensorii de tip impar, după formula

$$A_{i'_1 \dots i'_n} = - r_{i'_1 k_1} \dots r_{i'_n k_n} A_{k_1 \dots k_n}. \qquad (72.2)$$

Tabelul 72.1

Tabelul de înmulțire a grupurilor de inversie spațio-temporală, $\bar{1}1'$

	1	$\bar{1}$	$1'$	$\bar{1}'$
1	1	$\bar{1}$	$1'$	$\bar{1}'$
$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	$\bar{1}'$	$1'$
$1'$	$1'$	$\bar{1}'$	1	$\bar{1}$
$\bar{1}'$	$\bar{1}'$	$1'$	$\bar{1}$	1

Subliniem că $\|r_{i'k}\|$ este matricea care corespunde rotației proprii corespunzătoare, $R(\boldsymbol{k}, \varphi)$, nu a întregii transformări ortogonale.

În grupul ortogonal extins intră transformări de patru tipuri: rotațiile proprii, $R(\mathring{\boldsymbol{k}}, \varphi)$, și cele trei genuri de rotații improprii și anume, rotațiile cu inversie, $\bar{1}R(\mathring{\boldsymbol{k}}, \varphi)$, antirotațiile, $1'R(\mathring{\boldsymbol{k}}, \varphi)$ și antirotațiile cu inversie, $\bar{1}'R(\mathring{\boldsymbol{k}}, \varphi)$. Rezultatul aplicării consecutive a două rotații improprii se obține ușor folosind tabelul de înmulțire a grupului inversiilor spațio-temporale (tab. 72.1).

Se poate arăta destul de ușor că pe un grup ortogonal extins se pot defini tensori de patru tipuri, dintre care unul par și trei impari. Tensorii de tip par sînt invarianți la grupul inversiilor $\bar{1}1'$ și deci la orice transformare $JR(\mathring{\boldsymbol{k}}, \varphi)$, unde $J \in \bar{1}1'$, se vor transforma după formula (72.1). În cazul rotațiilor proprii, după aceeași formulă se transformă tensorii de orice tip.

Orice tensor de oricare dintre tipurile impare, sub acțiunea rotațiilor improprii de două genuri, se transformă după formula (72.2), iar sub acțiunea unei rotații de genul al treilea, după formula (72.1). Într-adevăr, fie ca tensorul considerat, sub acțiunea rotațiilor de inversie, să se transforme după formula (72.2). Sub acțiunea antirotațiilor el se va transforma fie după formula (72.1), fie după formula (72.2). Deoarece antirotația de inversie poate fi considerată ca produsul dintre o rotație de inversie și o antirotație, este clar că în primul caz tensorul dat, sub acțiunea antirotațiilor cu inversie, se transformă după formula (72.2), iar în al doilea caz, după formula (72.1).

Luînd în considerație toate posibilitățile, ajungem la concluzia că pe un grup ortogonal extins se pot defini exact trei tipuri de tensori impari. Denumirea tipurilor (electric, magnetic, magnetoelectric) se datorește faptului că acestor tipuri le revin vectorii intensitate a cîmpului electric, intensitate a cîmpului magnetic și tensorul polarizării magnetoelectrice (v. § 73).

Toţi tensorii definiţ i pe un grup ortogonal extins se transformă după formula

$$A_{i'_1\ldots i'_n} = \gamma r_{i'_1 k_1} \ldots r_{i'_n k_n} A_{k_1\ldots k_n}, \tag{72.3}$$

în care coeficientul $\psi = \pm 1$ depinde de tipul tensorului şi de genul de transformare şi se determină din tabelul 72.2, iar $\|r_{i'k}\|$ este matricea rotaţiei proprii corespunzătoare.

Tabelul 72.2

Coeficienţii γ din formula de transforma re a unui tensor definit pe un grup ortogonal extins

Tipul de tensor	Genul de transformare			
	R	$\bar{1}R$	$1'R$	$\bar{1}'R$
Par	1	1	1	1
Electric	1	−1	1	−1
Magnetic	1	1	−1	−1
Magnetoelectric	1	−1	−1	1

Simetria exterioară a tensorilor definiţi pe un grup ortogonal extins este determinată de grupul punctual maxim al simetriei magnetice la care este invariant tensorul dat. În tabelul 72.3 sînt

Tabelul 72.3

Simetria magnetică a scalarilor şi a vectorilor definiţi pe un grup ortogonal extins

Tipul de tensor	Scalar	Vector
Par	$\infty\infty m1'$	$\infty/mm1'$
Electric	$\infty\infty 1'$	$\infty/m1'$
Magnetic	$\infty\infty m$	∞/mm'
Magnetoelectric	$\infty\infty m'$	$\infty/m'm$

prezentate grupurile de simetrie magnetică ale scalarilor şi vectorilor tuturor celor patru tipuri. Comparînd cu acest tablou rezultatele studiului simetriei mărimilor electrice şi magnetice, efectuat la sfîrşitul paragrafului 68, vedem că intensităţile cîmpului electric şi a cîmpului magnetic sînt într-adevăr reprezentate de vectori de tip electric şi, respectiv, de tip magnetic. Însă sarcina electrică

este exprimată printr-un scalar de tip par (nu electric !). Sarcina magnetică, dacă ar exista, ar fi descrisă de un scalar de tip magnetoelectric.

Să examinăm simetria exterioară a tensorilor fiecărui tip în parte.

Tensorii de tip par, în cazul oricăror rotaţii improprii, se transformă exact la fel ca în cazul transformărilor proprii corespunzătoare acestora. De aceea, tensorii de material de tip par pentru toate clasele de simetrie magnetică, care fac parte din acelaşi sistem, sînt la fel. În general, tensorii de material de tip par sînt diferiţi de zero pentru cristalele tuturor claselor de simetrie magnetică. Dimpotrivă, tensorii de material de oricare dintre cele trei tipuri impare, pentru multe clase de simetrie magnetică, sînt identic egali cu zero.

Tensorii de tip electric se transformă, pentru orice antirotaţii, la fel ca pentru rotaţiile proprii corespunzătoare, iar pentru orice antirotaţii de inversie, ca pentru rotaţiile de inversie corespunzătoare. Din această cauză, este foarte uşor de dedus forma tensorului de tip electric, invariant faţă de un grup punctual de simetrie magnetică dată : este suficient să se renunţe la toate semnele prim în notaţia grupului şi să se deducă printr-un procedeu obişnuit (metoda verificării directe sau pur şi simplu cu ajutorul unor tabele), forma tensorului corespunzător de tip impar, invariant faţă de grupul punctual obişnuit, care se obţine. Prin urmare, problema simetriei magnetice a tensorilor de tip electric se reduce doar la problema simetriei obişnuite a tensorilor de tip impar.

Este clar că forma unui tensor de tip par, care să fie invariant faţă de grupul de simetrie magnetică dat, se determină exact la fel : din notarea grupului se renunţă la toate semnele prim şi se caută tensorul de tip par, invariant faţă de grupul obişnuit, care se obţine.

Tensorul de tip magnetic, după cum arată tabelul 72.2, se transformă, în cazul unei antirotaţii $1'R(\mathring{\mathbf{k}}, \varphi)$, ca un tensor de tip electric sub acţiunea rotaţiei cu inversie, corespunzătoare, $\bar{1}R(\mathring{\mathbf{k}}, \varphi)$. Antirotaţiile cu inversie, $\bar{1}'R(\mathring{\mathbf{k}}, \varphi)$, acţionează diferit asupra tensorilor de ambele tipuri. Rezultă deci următoarea regulă : un tensor de tip magnetic, invariant faţă de grupul magnetic, G, are exact aceeaşi formă ca şi tensorul de tip electric, invariant faţă de grupul magnetic, G_1. Pentru a obţine grupul G_1 din G, este necesar să se înlocuiască în G toate rotaţiile de inversie cu antirotaţiile corespunzătoare, iar antirotaţiile cu rotaţiile de inversie.

Analog se deduce o a doua regulă : *tensorul de tip magnetoelectric*, invariant faţă de grupul magnetic, G, are exact aceeaşi

Tabelul 72.4

Corespondenţa dintre grupurile de simetrie magnetică ale tensorilor de diferite tipuri

G	G_1	G_2
∞∞m1' ∞∞m ∞∞m'	∞∞m1' ∞∞1' ∞∞m'	∞∞m1' ∞∞m ∞∞1'
∞∞1' ∞∞	∞∞m ∞∞	∞∞m' ∞∞
m3'm m3m m3m' m'3m' m'3m	m3'm 43'2 $\bar{4}3'm$ m'3m' m'3m	m3'm m3m m3m' 43'2 $\bar{4}3'm$
$\bar{4}3'm$ $\bar{4}3m$ $\bar{4}3m'$	m3m' 4'32' $\bar{4}'3m'$	m'3m $\bar{4}3m$ 4'32'
43'2 432 4'32	m3m 432 $\bar{4}3m$	m'3m' 432 $\bar{4}'3m'$
m3' m3 m'3	m3' 23' m'3	m3' m3 23'
23' 23	m3 23	m'3 23
∞/mm1' ∞/mm ∞/m'm ∞/mm' ∞/m'm'	∞/mm1' ∞21' ∞/m'm ∞m1' ∞/m'm'	∞/mm1' ∞/mm ∞m1' ∞/mm' ∞21'
∞m1' ∞m ∞m'	∞/mm' ∞2' ∞m'	∞/m'm ∞m ∞2'
∞21' ∞2 ∞2'	∞/mm ∞2 ∞m	∞/m'm' ∞2 ∞m'
∞/m1' ∞/m ∞/m'	∞/m1' ∞1' ∞/m'	∞/m1' ∞/m ∞1'
∞1' ∞	∞/m ∞	∞/m' ∞
6/mmm1' 6/mmm 6/m'mm 6/mm'm' 6/m'm'm' 6'/mmm' 6'/m'mm'	6/mmm1' 6221' 6/m'mm 6mm1' 6/m'm'm' 6'/mmm' $\bar{6}m21'$	6/mmm1' 6/mmm 6mm1' 6/mm'm' 6221' $\bar{6}m21'$ 6'/m'mm'
$\bar{6}m21'$ $\bar{6}m2$ $\bar{6}'m2'$ $\bar{6}m'2'$ $\bar{6}'m'2$	6'/m'mm' 6'22' $\bar{6}'m2$ 6'mm' $\bar{6}'2m'2$	6'/mmm' $\bar{6}m2$ 6'mm' $\bar{6}m'2'$ 6'22'
6mm1' 6mm 6m'm' 6'mm'	6/mm'm' 62'2' 6m'm' $\bar{6}m2'$	6/m'mm 6mm 62'2' $\bar{6}'m2'$
6221' 622 62'2' 622'	6/mmm 622 6mm $\bar{6}m2$	6/m'm'm' 622 6m'm' $\bar{6}'m'2$
6/m1' 6/m 6/m' 6'/m 6'/m'	6/m1' 61' 6/m' 6'/m $\bar{6}1'$	6/m1' 6/m 61' $\bar{6}1'$ 6'/m'
$\bar{6}1'$ $\bar{6}$ $\bar{6}'$	6'/m' 6' $\bar{6}'$	6'/m $\bar{6}$ 6'
61' 6' 6'	6/m 6 $\bar{6}$	6/m' 6 $\bar{6}'$

Tabelul 72.4 (continuare)

G	G_1	G_2
$4/mmm1'$ $4/mmm$ $4/m'mm$ $4/mm'm'$ $4/m'm'm'$ $4'/mmm'$ $4'/m'mm'$	$4/mmm1'$ $4221'$ $4/m'mm$ $4mm1'$ $4/m'm'm'$ $\bar{4}2m1'$ $4'/m'mm'$	$4/mmm1'$ $4/mmm$ $4mm1'$ $4/mm'm'$ $4221'$ $4'/mmm'$ $\bar{4}2m1'$
$\bar{4}2m1'$ $\bar{4}2m$ $\bar{4}2'm'$ $\bar{4}'2'm$ $\bar{4}'2m'$	$4'/mmm'$ $4'22'$ $4'mm'$ $\bar{4}'2'm$ $\bar{4}'2m'$	$4'/m'mm'$ $\bar{4}2m$ $\bar{4}2'm'$ $4'mm'$ $4'22'$
$4mm1'$ $4mm$ $4m'm'$ $4mm'$	$4/mm'm'$ $42'2'$ $4m'm'$ $\bar{4}2'm'$	$4/m'mm$ $4mm$ $42'2'$ $\bar{4}'2'm$
$4221'$ 422 $42'2'$ $4'22'$	$4/mmm$ 422 $4mm$ $\bar{4}2m$	$4/m'm'm'$ 422 $4m'm'$ $\bar{4}'2m'$
$4/m1'$ $4/m$ $4/m'$ $4'/m$ $4'/m'$	$4/m1'$ $41'$ $4/m'$ $\bar{4}1'$ $4'/m'$	$4/m1'$ $4/m$ $41'$ $4'/m$ $\bar{4}1'$
$\bar{4}1'$ $\bar{4}$ $\bar{4}'$	$4'/m$ $4'$ $\bar{4}'$	$4'/m'$ $\bar{4}$ $4'$
$41'$ 4 $4'$	$4/m$ 4 $\bar{4}$	$4/m'$ 4 $\bar{4}'$
$\bar{3}m1'$ $\bar{3}m$ $\bar{3}m$ $\bar{3}m'm$ $\bar{3}'m'$	$\bar{3}m1'$ $3'2$ $3'm$ $\bar{3}'m$ $\bar{3}'m'$	$\bar{3}m1'$ $\bar{3}m$ $\bar{3}m'$ $3'm$ $3'2$
$3'm$ $3m$ $3m'$	$\bar{3}m'$ $32'$ $3m'$	$\bar{3}'m$ $3m$ $32'$
$3'2$ 32 $32'$	$\bar{3}m$ 32 $3m$	$\bar{3}'m'$ 32 $3m'$

G	G_1	G_2
$\bar{3}1'$ $\bar{3}$ $\bar{3}'$	$\bar{3}1'$ $3'$ $\bar{3}'$	$\bar{3}1'$ $\bar{3}$ $3'$
$3'$ 3	$\bar{3}$ 3	$3'$ 3
$mmm1'$ mmm mmm' $mm'm$ $m'm'm'$	$mmm1'$ $2221'$ mmm' $mm21'$ $m'm'm'$	$mmm1'$ mmm $mm21'$ $mm'm'$ $2221'$
$mm21'$ $mm2$ $m'm'2$ $mm'2'$	$mm'm'$ $22'2'$ $m'm'2$ $mm'2'$	mmm' $mm2$ $22'2'$ $mm'2'$
$2221'$ 222 $22'2'$	mmm 222 $mm2$	$m'm'm'$ 222 $m'm'2$
$2/m1'$ $2/m$ $2/m'$ $2'/m$ $2'/m'$	$2/m1'$ $21'$ $2/m'$ $2'/m$ $m1'$	$2/m1'$ $2/m$ $21'$ $m1'$ $2'/m'$
$m1'$ m m'	$2'/m'$ $2'$ m'	$2'/m$ m $2'$
$21'$ 2 $2'$	$2/m$ 2 m	$2/m'$ 2 m'
$\bar{1}1'$ $\bar{1}$ $\bar{1}'$	$\bar{1}1'$ $1'$ $\bar{1}'$	$\bar{1}1'$ $\bar{1}$ $1'$
$1'$ 1	$\bar{1}$ 1	$\bar{1}'$ 1

formă ca tensorul de tip electric, invariant față de grupul magnetic, G_2. Pentru a obține grupul G_2 din G trebuie ca în G să se înlocuiască antirotațiile cu antirotațiile de inversie corespunzătoare, iar antirotațiile de inversie cu antirotațiile simple.

Grupurile G_1 și G_2, pentru oricare grup dat al simetriei magnetice, se pot deduce ușor cu ajutorul tabelului 72.4, iar problema formei tensorului de tip electric, invariant față de un grup de simetrie magnetică dat, a fost tratată mai sus. Rezultă deci că problemele formale ale cristalofizicii magnetice pot fi astfel reduse la problemele deja rezolvate ale fizicii clasice a cristalelor (Sirotin, 1962; Birss, 1962).

§ 73. EFECTUL PIEZOMAGNETIC ȘI EFECTUL MAGNETOELECTRIC

Dacă între forțele termodinamice generalizate, X_B (v. § 57), includem cele trei componente ale vectorului intensitate a cîmpului magnetic, H_k, iar printre coordonatele generalizate, x_k, se includ cele trei componente ale vectorului inducție magnetică, împărțite la 4π,

$$\tilde{B}_i = \frac{1}{4\pi} B_i,$$

atunci ordinul matricei termodinamice se mărește la 13. Dependența coordonatelor termodinamice generalizate de forțele termodinamice generalizate, în aproximația liniară, capătă atunci forma (de comparat cu relația (57.18))

$$\Sigma = (C_p/T)\Theta + p_k E_k + q_k H_k + \alpha_\mu \sigma_\mu, \qquad (73.1,\ a)$$

$$\tilde{D}_i = p_i\Theta + (1/4\pi)\varkappa_{ik} E_k + (1/4\pi)\nu_{ik} H_k + d_{i\mu}\sigma_\mu, \qquad (73.1,\ b)$$

$$\tilde{B}_i = q_i\Theta + (1/4\pi)\nu_{ki} E_k + (1/4\pi)\mu_{ik} H_k + b_{i\mu}\sigma_\mu, \qquad (73.1,\ c)$$

$$\varepsilon_\lambda = \alpha_\lambda\Theta + d_{k\lambda} E_k + b_{k\lambda} H_k + s_{\lambda\mu}\sigma_\mu. \qquad (73{,}1,\ d)$$

În relațiile (73.1), pe lîngă tensorii de material cunoscuți, există și unii noi, care descriu efecte încă nestudiate de noi. Esența acestor efecte poate fi ușor stabilită prin analogie cu efectele electrice corespunzătoare. Astfel, coeficienții q_i caracterizează, evident, *efectul piromagnetic*, și efectul invers acestuia, *efectul magnetocaloric liniar*, reprezentînd, în ansamblul lor, vectorul coeficienților piromagnetici, $\boldsymbol{q}$. Coeficienții $b_{i\mu}$ descriu *efectul piezomag-*

netic direct şi *efectul piezomagnetic invers*; în total ei compun un tensor de rangul trei, simetric în raport cu doi indici — tensorul coeficienţilor piezomagnetici, $\mathfrak{b}$. În fine, coeficienţii μ_{ik} formează un tensor simetric de rangul doi — tensorul permeabilităţii magnetice, $\boldsymbol{\mu}$.

Nu există un analog al coeficienţilor ν_{ik}. Ei exprimă *efectul magnetoelectric direct* şi *efectul magnetoelectric invers*: cristalele pentru care aceşti coeficienţi sînt diferiţi de zero, fiind introduse în cîmp magnetic se polarizează (efectul direct), iar introduse în cîmp electric se magnetizează (efectul invers). Aceşti coeficienţi formează în ansamblu un tensor nesimetric de rangul doi, $\boldsymbol{\nu}$ — tensorul coeficienţilor magnetoelectrici.

Să transcriem din formulele (73.1) termenii care conţin noii tensori de material şi să notăm tipul mărimii tensoriale care li se atribuie. Obţinem

$$\Sigma = \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{H} + \ldots \qquad (\text{par}) = \boldsymbol{q}\cdot(\text{magnetic}),$$

$$\tilde{\boldsymbol{D}} = \boldsymbol{\nu}\cdot\boldsymbol{H} + \ldots \qquad (\text{electric}) = \boldsymbol{\nu}\cdot(\text{magnetic}),$$

$$\tilde{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{\nu} + \ldots \qquad (\text{magnetic}) = (\text{electric})\cdot\boldsymbol{\nu},$$

$$\tilde{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{H} + \ldots \qquad (\text{magnetic}) = \boldsymbol{\mu}\cdot(\text{magnetic}),$$

$$\tilde{\boldsymbol{B}} = \mathfrak{b} : \boldsymbol{\sigma} + \ldots \qquad (\text{magnetic}) = \mathfrak{b} : (\text{par})$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{H}\cdot\mathfrak{b} + \ldots \qquad (\text{par}) = (\text{magnetic})\cdot\mathfrak{b}\,.$$

De aici reiese clar tipul fiecăruia dintre tensorii de material care ne interesează: $\boldsymbol{q}$ — de tip magnetic, $\mathfrak{b}$ — de tip magnetic, $\boldsymbol{\mu}$ — de tip par, $\boldsymbol{\nu}$ — de tip magnetoelectric.

Forma fiecăruia dintre aceşti tensori, pentru oricare dintre clasele de simetrie magnetică, se poate deduce destul de uşor folosind metodele expuse în paragraful 72. Aici vom menţiona doar în care dintre clase sînt posibile efectele descrise de aceşti tensori.

Efectul piromagnetic este exprimat prin vectorul de material $\boldsymbol{q}$, care este de tip magnetic. Evident, acest vector nu este identic nul numai în acele cristale ale căror grupuri de simetrie magnetică sînt subgrupuri ale grupului de simetrie a vectorului de tip magnetic, ∞/mm'. Acestea sînt grupurile punctuale, deja cunoscute, ale feromagneticilor; toate aceste grupuri au fost enumerate în paragraful 70.

Efectul piezomagnetic este exprimat de tensorul ***b***. Acesta este un tensor de rangul trei, de tip magnetic, simetric în raport cu ultimii doi indici. Ca toţi tensorii de tip magnetic, el devine zero în cristalele ale căror grupuri de simetrie conţin inversia timpului sau antiinversia, însă nu numai în ele. De fapt, tensorul coeficienţilor piezomagnetici este analog cu tensorul coeficienţilor piezoelectrici. Acesta din urmă, după cum ştim din fizica clasică (nemagnetică) a cristalelor, devine zero nu numai în cristalele care au centru de simetrie, ci și în cristalele din clasa 432. De aici rezultă deci (v. tab. 72.4) că el devine zero în cristalele claselor magnetice 43′2, 4′32′ și 432. Înlocuind în aceste clase, cu ajutorul aceluiaşi tabel, antirotaţiile prin rotaţiile cu inversie, obţinem clasele nemagnetice $m3m$, $\bar{4}3m$ și 432, în care, evident, tensorul coeficienţilor piezomagnetici este egal cu zero.

Efectul magnetoelectric este exprimat prin tensorul de rangul doi, **v**, de tip magnetoelectric, care, în general, este nesimetric. Ca toţi tensorii de tip magnetoelectric, el este egal cu zero în cristalele ale căror grupuri de simetrie magnetică conţin inversia timpului sau inversia obişnuită (spaţială). Tensorul coeficienţilor magnetoelectrici este analog cu tensorul (nesimetric) activităţii optice totale. După cum se ştie, tensorul activităţii optice totale (v. tabelele 47.1 și E.9) este egal cu zero nu numai în cristalele care au un centru de simetrie, ci și în cristalele din clasele $\bar{4}3m$, $\bar{6}m2$ și $\bar{6}$; prin urmare, în cristalele din clasele magnetice $\bar{4}3'm$, $\bar{4}3m$, $\bar{4}'3m'$, $\bar{6}m21'$, $\bar{6}m2$, $\bar{6}'m2'$, $\bar{6}m'2'$, $\bar{6}'m'2$, $\bar{6}1'$, $\bar{6}$ și $\bar{6}'$. Înlocuind în aceste clase toate antirotaţiile cu antirotaţiile cu inversie corespunzătoare, iar rotaţiile cu inversie, cu antirotaţiile simple, obţinem clasele magnetice $m3m'$, $\bar{4}3m$, $\bar{4}'32$, $6'/mmm'$, $\bar{6}m2$, $6'mm'$, $\bar{6}m'2'$, $6'22'$, $6'/m$, $\bar{6}$ și $6'$; în cristalele din clasele enumerate efectul magnetoelectric nu este posibil.

Folosindu-ne de aceeași analogie, este uşor de arătat că în cristalele din clasele magnetice $m'3m'$, 432, $\bar{4}'3m'$, $m'3$ și 23 tensorul coeficienţilor magnetoelectrici este izotrop. Rezultă deci că pentru orice direcţie a cîmpului magnetic, un cristal din aceste clase supus cîmpului se va polariza după aceeaşi direcţie. Şi invers, un cristal de acest fel fiind introdus într-un cîmp electric orientat oricum se magnetizează în aceeași direcţie.

Din această analogie se poate deduce, de asemenea, că și pentru texturile din clasele magnetice $\infty/m'm$, ∞m, $\infty 2'$ și, respectiv, cristalele din clasele magnetice $6/m'mm$, $6mm$, $62'2'$, $4/m'mm$, $4mm$, $42'2'$, $3m$, $32'$ precum și $\bar{6}'m2'$, $\bar{4}'2'm$ și $\bar{3}'m$ tensorul coeficienţilor magnetoelectrici este antisimetric. Aceste cristale introduse în cîmp magnetic (sau electric) se polarizează (sau se magnetizează) după o direcţie perpendiculară pe cîmp. Cel mai

comod este ca cîmpul să fie orientat perpendicular pe axa principală de simetrie a cristalului; polarizarea (magnetizarea) este, de asemenea, perpendiculară pe această axă.

Tensorii efectului piezomagnetic şi ai efectului magnetoelectric îşi schimbă semnul la operaţia de inversie a timpului şi, prin urmare, sînt identic egali cu zero în toate cristalele care nu au structură magnetică. Pînă la introducerea în fizică a noţiunii de simetrie magnetică se considera că efectul piezomagnetic se deosebeşte ca simetrie de efectul piezoelectric, numai pentru că vectorii care definesc cîmpul magnetic sînt axiali, în timp ce vectorii care exprimă cîmpul electric sînt polari. S-a presupus, din această cauză, că simetria internă a tensorului coeficienţilor piezomagnetici este $\varepsilon V[V^2]$; de aici a fost calculată forma generală a acestui tensor pentru toate clasele cristalografice (v. tab. E.14). Întrucît pentru toate clasele în afară de trei ($m3m$, 432 şi $\bar{4}3m$), acest tensor este diferit de zero, au fost întreprinse nenumărate încercări de a descoperi un efect piezomagnetic la cristalele care nu au structură magnetică; toate încercările nu au avut, fireşte, nici un succes. Abia după ce Dzealoşinski (1957, 1959) a demonstrat că atît efectul piezomagnetic cît şi efectul magnetoelectric sînt posibile numai în cristalele care au o structură magnetică şi a enumerat cîteva dintre cristalele a căror simetrie magnetică permite aceste efecte, Borovik-Romanov (1959, 1960) a descoperit efectul piezomagnetic în cristalele de CoF_2 şi MnF_2, iar Astrov (1960) efectul magnetoelectric în cristalele de Cr_2O_3.

Faptul că cristalul are o structură magnetică este o condiţie necesară dar nu şi suficientă pentru apariţia în acest cristal a efectelor descrise de tensorii de tip magnetic sau de tip magnetoelectric. Dacă un cristal are structură magnetică, atunci se poate afirma că grupul lui spaţial nu conţine inversia timpului (nu este „cenuşiu"). Pentru a nu deveni zero tensorii de material de tipul magnetic şi de tipul magnetoelectric, este necesar ca grupul punctual al simetriei magnetice a cristalului să nu conţină inversia timpului (să nu fie cenuşiu). Aceasta este o condiţie considerabil mai restrictivă; ea nu este satisfăcută de cristalele denumite în paragraful 70 antiferomagnetici de tipul II (acestea sînt cristalele în ale căror grupuri Şubnikov intră antitranslaţiile). Aşadar, efectele determinate de tensorii de tip magnetic şi de tip magnetoelectric nu sînt posibile nu numai în cristalele care nu au structură magnetică, ci nici în antiferomagneticii de tipul II.

Asupra problemelor tratate în acest capitol, vezi K. P. Belov (1959); K. P. Belov, Beleancikova, Levitin şi Nikitin (1965); Vonsovski (1981); Iziumov şi Ozerov (1966); Kopţik (1966, 1967); Landau şi Lifşiţ (1957); Turov (1963); Şubnikov (1951); Şubnikov şi Kopţik (1972); Birss (1964); Bhagavantam (1966).

CAPITOLUL 9

EFECTE DE ORDIN SUPERIOR

§ 74. STUDIUL TERMODINAMIC AL EFECTELOR NELINIARE

Pentru ca în cadrul termodinamicii cristalelor (v. §§ 57, 60, 61, 63) să abordăm efectele neliniare, trebuie să se ia în considerare termenii de gradul trei în dezvoltările potențialelor termodinamice. Astfel, pentru un potențial termodinamic Φ și procese izotermice ($\Theta = 0$) trebuie ca în loc de (60.8) să se folosească dezvoltarea

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial X_a \partial X_b}\right)_0 X_a X_b + \frac{1}{6}\left(\frac{\partial^3\Phi}{\partial X_a\, \partial X_b\, \partial X_c}\right)_0 X_a\, X_b\, X_c$$

$$(a, b, c = 1, \ldots, 9),$$

unde X_a sînt componentele vectorului intensitate a cîmpului electric, $\boldsymbol{E}$, și ale tensorului tensiunilor, $\boldsymbol{\sigma}$. Ținînd seama de relațiile (57.13), (57.14) și (57.17) și utilizînd pentru derivatele de ordinul trei ale potențialului termodinamic notațiile

$$R_{ijk} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^3\Phi}{\partial E_i\, \partial E_j \partial E_k}\right)_0, \quad P_{ij\lambda} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^3\Phi}{\partial E_i \partial E_j \partial \sigma_\lambda}\right)_0, \tag{74.1}$$

$$Q_{i\lambda\mu} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^3\Phi}{\partial E_i\, \partial \sigma_\lambda\, \partial \sigma_\mu}\right)_0, \quad L_{\lambda\mu\nu} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^3\Phi}{\partial \sigma_\lambda\, \partial \sigma_\mu \partial \sigma_\nu}\right)_0,$$

vom scrie această dezvoltare sub forma

$$\Phi = \Phi_0 - \frac{1}{2}\, \tilde{\varkappa}_{ij}\, E_i\, E_j - d_{i\lambda}\, E_i\, \sigma_\lambda - \frac{1}{2}\, s_{\lambda\mu}\, \sigma_\lambda\, \sigma_\mu - \frac{1}{3}\, R_{ijk} E_i E_j E_k - \tag{74.2}$$

$$- P_{ij\lambda}\, E_i\, E_j\, \sigma_\lambda - Q_{i\lambda\mu}\, E_i\, \sigma_\lambda\, \sigma_\mu - \frac{1}{3}\, L_{\lambda\mu\nu}\, \sigma_\lambda\, \sigma_\mu\, \sigma_\nu.$$

De aici, cu ajutorul relației (57.7), vom obține pentru vectorul inducție electrică, $\boldsymbol{D}$, și pentru tensorul micilor deformări, ε, relațiile generalizate (57.18)

$$\tilde{D}_i = \tilde{\varkappa}_{ij}E_j + d_{i\lambda}\sigma_\lambda + \tilde{R}_{ijk}E_jE_k + 2P_{ij\lambda}E_j\sigma_\lambda + Q_{i\lambda\mu}\sigma_\lambda\sigma_\mu, \qquad (74.3,\ a)$$

$$\varepsilon_\lambda = d_{i\lambda}E_i + s_{\lambda\mu}\sigma_\mu + P_{ij\lambda}E_iE_j + 2Q_{i\lambda\mu}E_i\sigma_\mu + L_{\lambda\mu\nu}\sigma_\mu\sigma_\nu; \qquad (74.3,\ b)$$

ca și în capitolul 7, tilda înseamnă împărțirea la 4π.

În locul coeficienților $P_{ij\lambda}$, $Q_{i\lambda\mu}$, $L_{\lambda\mu\nu}$ în relațiile pentru $\tilde{\boldsymbol{D}}$ și ε se pot folosi componentele tensorilor de material corespunzători

$$\tilde{D}_i = \tilde{\varkappa}_{ij}E_j + d_{ijk}\sigma_{jk} + \tilde{R}_{ijk}E_jE_k + 2P_{ijkl}E_j\sigma_{kl} + Q_{ijkml}\sigma_{jk}\sigma_{lm}, \qquad (74.4,\ a)$$

$$\varepsilon_{ij} = d_{kij}E_k + s_{ijkl}\sigma_{kl} + P_{klij}E_kE_l + 2Q_{kijlm}E_k\sigma_{lm} + L_{ijklmn}\sigma_{kl}\sigma_{mn}. \qquad (74.4,\ b)$$

Simetria internă și denumirile acestor tensori sînt următoarele:

R $\sim [V^3]$ — tensorul coeficienților pătratici ai permitivității dielectrice;

P $\sim [V^2]^2$ — tensorul coeficienților de electrostricțiune;

Q $\sim V\,[[V^2]^2]$ — tensorul coeficienților piezoelectrici pătratici;

L $\sim [[V^2]^3$ — tensorul coeficienților pătratici ai deformabilității elastice*.

Regulile de calcul care leagă componentele acestor tensori de coeficienții $P_{ij\lambda}$, $Q_{i\lambda\mu}$ și $L_{\lambda\mu\nu}$ sînt demonstrate în anexa F. Simetria exterioară a acestor tensori, ca a oricărui tensor de material, nu este inferioară simetriei cristalului; forma lor generală pentru diferite clase este dată în anexa E (v. și § 48).

Tensorii **P** și **L** sînt de tip par; ei sînt diferiți de zero pentru toate clasele de simetrie ale cristalelor. Coeficienții pătratici ai deformabilității elastice exprimă micile corecții la legea lui Hooke. Coeficienții de electrostricțiune descriu însă micile corecții ale efectului piezoelectric invers, din cristalele piezoelectrice, pe cînd în cristalele din clasele nepiezoelectrice precum și în toate corpurile izotrope, toată deformarea provocată de acțiunea cîmpului electric se reduce la electrostricțiune.

---

* În literatură se pot întîlni diferite variante de definiții ale acestor tensori, în particular, cele ce nu cuprind coeficientul 1/2 în formulele (74.1); se înțelege, în acest caz, coeficientul 1/2 apare în relațiile (74.2)—(74.4). În felul acesta sînt definiți tensorii $g_{\lambda\mu\varkappa}$ și $c_{\lambda\mu\nu}$ cu ajutorul formulelor (74.5)—(74.8).

Tensorii **R** și **Q** sînt de tip impar. Tensorii **Q** sînt diferiți de zero pentru cristalele tuturor claselor fără centru de simetrie. În particular, la cristalele din clasa 432, în care efectul piezoelectric liniar obișnuit nu este posibil, ar putea să se observe un efect piezoelectric pătratic: însă polarizarea electrică sub acțiunea tensiunilor mecanice este proporțională nu cu componentele tensorului tensiunilor, ci cu unele produse de perechi de componente. Tensorii coeficienților pătratici ai permitivității dielectrice, **R**, sînt diferiți de zero numai în cazul cristalelor a căror simetrie permite apariția efectului piezoelectric longitudinal; forma generală a unor asemenea tensori este dată în tabelul E. 10, iar clasele de simetrie ale acestui efect, în tabelul 58.3.

Faptul că influența tensiunilor mecanice asupra permitivității dielectrice, în formulele (74.3, a) și (74.4, a), este descrisă de aceiași coeficienți care în relațiile (74.3, b) și (74.4, b) descriu electrostricțiunea, este urmare a faptului că acești coeficienți sînt derivate de ordinul al treilea ale potențialului termodinamic (v. (74.1)). Din aceeași cauză, și coeficienții efectului piezoelectric pătratic exprimă, de asemenea, influența cîmpului electric asupra coeficienților deformabilității elastice.

Posibilitatea utilizării chiar și numai aproximative a considerentelor termodinamice pentru reducerea numărului de coeficienți trebuie avută în vedere în cazul analizei efectelor de ordin superior. De exemplu, propagarea undelor elastice într-un cristal supus unei tensiuni statice, σ^{st}, cu mult mai mare decît tensiunile legate de unda elastică, se determină cu ajutorul coeficienților de elasticitate

$$c_{\lambda\mu} = c^{(0)}_{\lambda\mu} + g_{\lambda\mu\varkappa}\sigma^{st}_{\varkappa}, \tag{74.5}$$

în care $c^{(0)}_{\lambda\mu}$ sînt coeficienții de elasticitate ai unui cristal netensionat (asupra propagării undelor elastice în aceste condiții și a altor probleme ale acusticii liniare a cristalelor, vezi Terston, 1966; Zarembo și Krasilnikov, 1970). Coeficienții $g_{\lambda\mu\varkappa}$ sînt componentele tensorului de simetrie internă $[[V^2]^2]\,[V^2]$, care, în general, are 126 de componente independente. Să analizăm acum energia elastică a unui cristal, cu o exactitate de pînă la puterea a treia a termenilor în deformații

$$W = \frac{1}{2} c^{(0)}_{\lambda\mu}\, \varepsilon_\mu\, \varepsilon_\mu + \frac{1}{6} C_{\lambda\mu\nu}\, \varepsilon_\lambda\, \varepsilon_\mu\, \varepsilon_\nu\,. \tag{74.6}$$

Evident, $C_{\lambda\mu\nu} = \partial^3 W/\partial\varepsilon_\lambda \partial\varepsilon_\mu \partial\varepsilon_\nu$ sînt componentele unui tensor de simetrie internă $[[V^2]^3]$, care are, în general, conform tabelului 47.1, a și 47.1, b, 56 de componente independente. Diferențiind

energia elastică, (74.6), de două ori în raport cu deformațiile, găsim

$$c_{\lambda\mu} = \frac{\partial^2 W}{\partial \varepsilon_\lambda \, \partial \varepsilon_\mu} = c^{(0)}_{\lambda\mu} + C_{\lambda\mu\nu} \, \varepsilon_\nu, \qquad (74.7)$$

în care ε_ν poate fi, evident, considerată ca ε^{st}_ν. Cu gradul de exactitate luat aici,

$$\varepsilon^{st}_\nu = s_{\nu\varkappa} \sigma^{st}_\varkappa$$

în care $s_{\nu\varkappa}$ este coeficientul deformabilității elastice și, deci

$$c_{\lambda\mu} = c^{(0)}_{\lambda\mu} + C_{\lambda\mu\nu} s_{\nu\varkappa} \sigma^{st}_\varkappa.$$

Comparînd ultima relație cu (74.5) obținem

$$g_{\lambda\mu\varkappa} = C_{\lambda\mu\varkappa} \, s_{\nu\varkappa}. \qquad (74.8)$$

Relația (74.8) nu contrazice faptul că simetria internă a tensorului **g** este egală cu $[[V^2]^2]\,[V^2]$, însă reduce categoric numărul de componente independente ale acestui tensor : de la 126 la 56 + + 21 = 77, dintre ele caracterizînd proprietățile liniar elastice numai 56. La deducerea relației (74.8) nu s-a ținut seama de diferența dintre coeficienții izotermici și coeficienții adiabatici; luînd în considerație această diferență la definirea termenului principal, adică a lui $c^{(0)}_{\lambda\mu}$, se pare că ea poate fi neglijată în cadrul evaluării micilor corecții ale acestuia.

Forma tensorilor $C_{\lambda\mu\nu}$ și $g_{\lambda\mu\nu}$, pentru unele clase, este dată în tabelele E.24 și E.25, iar valorile determinate experimental pentru $C_{\lambda\mu\nu}$ sînt cuprinse în tabelul 74.1. Se efectuează lucrări avînd ca scop și determinarea experimentală a celorlalți tensori de acest fel, cum ar fi tensorul efectului piezoelectric pătratic și tensorul de rangul cinci, care definește componenta deformației care depinde de cubul intensității cîmpului electric

$$\varepsilon^{(3)}_{ij} = \lambda_{ijklm} E_k E_l E_m.$$

Însă deocamdată s-au obținut numai unele componente ale acestor tensori — ale celui dintîi, pentru dihidrofosfatul de amoniu (Janik și Hruška, 1970) și pentru cuarț α (Hruška și Khogali, 1971), iar al celui de al doilea, pentru monocristalul de telur (Ehyshima și Ogawa, 1971) — care nu formează seturi complete de componente independente.

Tabelul 74.1

Coeficienţii pătratici ai elasticităţii (în 10^{12} dyn/cm²) pentru unele cristale din clasa $m3m$ şi pentru cuarţ (clasa 32)

Coeficienţii $C_{\lambda\mu\nu}$ sînt legaţi de componentele tensorului C_{ijklmn} prin regula de calcul $C_{\lambda\mu\nu} = C_{ijklmn}$ $(\lambda, \mu, \nu = 1, \ldots, 6)$

Cristalele	C_{111}	C_{112}	C_{123}	C_{456}	C_{144}	C_{55}
NaCl	−8,43	−0,50	0,46	0,26	0,29	−0,60
KCl	−7,26	−0,24	0,11	0,16	0,23	−0,26
LiF	−14,23	−2,64	1,56	0,94	0,85	−2,73
Ge	−7,10	−3,89	−0,18	−0,53	−0,23	−2,92
Si	−8,25	−4,51	−0,64	−0,64	0,12	−3,10
Cu	−12,71	−8,14	−0,50	−0,95	−0,03	−7,80
Ag	−8,43	−5,29	1,89	0,83	0,56	−6,37
Au	−17,29	−9,22	−2,33	−0,12	−0,13	−6,48
MgO	−48,95	−0,95	−0,69	1,47	1,13	−6,59
Cuarţ (SiO_2)	−2,10	−3,45	−2,94		−1,34	−2,0
	C_{113}	C_{114}	C_{124}	C_{133}	C_{134}	C_{222}
	0,12	−1,63	−0,15	−3,12	+0,02	−3,32
	C_{333}	C_{344}	C_{444}			
	−8,15	−1,10	−2,76			

§ 75. EFECTUL PIEZOREZISTIV

Efectul piezorezistiv (tensorezistiv) constă în variaţia rezistenţei electrice a unui material, sub acţiunea tensiunilor mecanice (sau a deformaţiilor). Efectul piezorezistiv se manifestă la numeroase substanţe, printre care şi la metale, fiind însă cel mai intens la semiconductori, ceea ce tocmai permite utilizarea materialelor semiconductoare Ge, Si, GaSb, InSb, PbTe, Bi_2Te_3 pentru realizarea din ele a unor tensotraductoare sensibile, adică a unor aparate care transformă deformaţiile mecanice (tensiunile) în mărimi electrice.

Efectul piezorezistiv poate fi definit drept variaţia tensorului rezistivităţii cristalului ρ_{il} sub acţiunea tensiunilor σ_{mn}

$$E_i = (\rho^0_{il} + P_{ilmn}\sigma_{mn})j_l\,; \tag{75.1}$$

aici $\boldsymbol{E}$ este intensitatea cîmpului electric, $\boldsymbol{j}$ — densitatea de curent, ρ^0_{il} — tensorul rezistivităţii cristalului în absenţa tensiunilor mecanice. Mai des însă, proprietăţile piezorezistive ale unui cristal sînt caracterizate de tensorul coeficienţilor piezorezistivi, Π_{klmn}, care este legat de tensorul P_{ilmn} prin relaţia

$$P_{ilmn} = \rho^0_{ik}\,\Pi_{klmn}\,; \tag{75.2}$$

în acest caz, ecuaţia efectului piezorezistiv capătă forma

$$E_j = \rho^0_{ik}(\delta_{kl} + \Pi_{klmn}\,\sigma_{mn})j_l. \tag{75.3}$$

Pentru cristalele din sistemul cubic, din care fac parte majoritatea cristalelor semiconductoare, utilizate ca tranzistori,

$$\rho^0_{ik} = \rho^0\,\delta_{ik}$$

iar

$$E_i = \rho^0\,(\delta_{kl} + \Pi_{klmn}\,\sigma_{mn})j_l. \tag{75.4}$$

Celălalt aspect al efectului piezorezistiv — dependenţa rezistivităţii cristalului de deformarea ε_{pq} — se exprimă prin ecuaţia

$$E_i = \rho^0_{ik}\,(\delta_{kl} + m_{klpq}\,\varepsilon_{pq})j_l\,; \tag{75.5}$$

tensorul coeficienţilor elastorezistivi, **m**, este legat de tensorul **Π** prin relaţiile care rezultă din legea lui Hooke

$$m_{klpq} = \Pi_{klmn}\,c_{mnpq},\ \Pi_{klmn} = m_{klpq}\,s_{pqmn}, \tag{75.6}$$

în care c_{mnpq} sînt coeficienţii de elasticitate, s_{pqmn} sînt coeficienţii deformabilităţii elastice.

Simetria internă a tensorilor coeficienţilor piezorezistivi şi elastorezistivi este $[V^2]^2$; în funcţie de simetria în raport cu indicii tensorilor ρ_{kl}, σ_{mn} şi ε_{pq} ei sînt simetrici în raport cu primii doi şi cu următorii doi indici

$$\Pi_{\nu\mu} = \Pi_{lkmn} = \Pi_{klnm} = \Pi_{lknm}. \tag{75.7}$$

Aceşti tensori pot fi scrişi şi cu cîte doi indici: $\Pi_{\lambda\mu}$ s-a convenit să fie corelaţi cu Π_{klmn} prin relaţiile

$$\Pi_{klmn} = \begin{cases} \Pi_{klmn} & (kl \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots, 6;\quad mn \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2\Pi_{klmn} & (kl \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots, 6;\quad mn \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6) \end{cases}$$

(la fel fiind şi relaţia care leagă pe $P_{\lambda\mu}$ cu P_{klmn}), iar $m_{\lambda\nu}$ cu m_{klpq} prin relaţia

$$m_{\lambda\nu} = m_{klpq}\,(kl \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots, 6;\quad pq \leftrightarrow 1, \ldots, 6)\,;$$

în acest caz relaţiile (75.6) capătă forma

$$m_{\lambda\nu} = \Pi_{\lambda\mu}\, c_{\mu\nu}, \quad \Pi_{\lambda\mu} = m_{\lambda\nu}\, s_{\nu\mu}. \tag{75.8}$$

Pentru toate clasele cristalografice şi clasele limită, forma generală a tensorilor care au această simetrie este dată în tabelul E.19, iar coeficienţii $\Pi_{\lambda\mu}$, determinaţi experimental, în tabelul 75.1.

Tabelul 75.1

Coeficienţii piezorezistivi ai unor cristale semiconductoare cubice (în 10^{11} N/m²)

Cristalul	ρ, $\Omega\cdot$m	Π_{11}	Π_{12}	Π_{44}	Cristalul	ρ, $\Omega\cdot$m	Π_{11}	Π_{12}	Π_{44}
n–Ge	990	−4,7	−5,0	−137,9	p–PbTe	—	+35,0	+40,0	+185,0
n–Ge	150	−2,3	−3,2	−138,1	n–PbTe	—	+20,0	+25,0	−107,0
p–Ge	110	−3,7	+3,2	+96,7	n–PbS	—	+11,6	+6,6	−11,2
n–Si	1170	−102,2	+53,4	−13,6	n–InSb	—	+81,6	+114,2	+83,0
p–Si	780	+6,6	−1,1	+138,3	p–InSb	—	−70,0	−115,0	−10,0

În cadrul aplicaţiilor practice ale efectului piezorezistiv, se măsoară diferenţa de potenţial, U, după direcţia vectorului unitar $\boldsymbol{u}$ şi intensitatea curentului, I. Atunci densitatea de curent este

$$\boldsymbol{j} = (I/S)\, \boldsymbol{q},$$

unde $\boldsymbol{q}$ este vectorul unitar al direcţiei curentului, iar S este suprafaţa secţiunii transversale a tensorezistorului. Deoarece

$$U = a\boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{u},$$

în care a este baza la capetele căreia s-a măsurat diferenţa de potenţial, din ecuaţia (75.3) obţinem

$$U = (aI/S)\, \rho^0_{ik}\, u_i (\delta_{kl} + \Pi_{klmn}\, \sigma_{mn}) q_l. \tag{75.9}$$

În particular, dacă se măsoară diferenţa de potenţial în direcţia curentului, vectorii $\boldsymbol{u}$ şi $\boldsymbol{q}$ coincid; pentru cristalele cu rezistenţa electrică izotropă, aceasta dă

$$U = (\rho^0 aI/S)\,(1 + \Pi_{klmn}\, q_k\, q_l\, \sigma_{mn}). \tag{75.10}$$

S-ar putea să fie de preferat ca diferenţa de potenţial să fie proporţională cu tensiunile mecanice şi să devină zero în absenţa lor. În cazul unor rezistenţe electrice izotrope, pentru aceasta este necesar ca vectorii $\boldsymbol{u}$ şi $\boldsymbol{q}$ să fie reciproc perpendiculari; atunci

$$U = (\rho^0 aI/S)\,\Pi_{klmn}\, u_k q_l \sigma_{mn}, \qquad u_i q_i = 0 \tag{75.11}$$

(în cazul general, direcţiile $\boldsymbol{u}$ şi $\boldsymbol{q}$ se iau astfel încît $\rho^0_{ik} u_i q_k = 0$).

Concretizarea ulterioară a acestor forme se determină prin orientarea tensiunilor mecanice faţă de direcţia curentului şi direcţia de măsurare a diferenţei de potenţial. Astfel, în cazul suprapunerii direcţiilor după care circulă curentul, după care se fac măsurătorile de diferenţă de potenţial şi a întinderii uniaxe, $\boldsymbol{\sigma} = \sigma \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}$, avem de-a face cu efectul piezorezistiv longitudinal

$$U = (\rho^0 aI/S)\,(1 + \sigma \Pi_{klmn}\, q_k q_l q_m q_n), \tag{75.12}$$

iar în cazul în care vectorii $\boldsymbol{u}$ şi $\boldsymbol{q}$ sînt reciproc perpendiculari, iar direcţia întinderii uniaxe coincide cu unul dintre ei (să zicem cu $\boldsymbol{q}$)

$$U = (\rho^0 aI/S)\,\sigma \Pi_{klmn}\, u_k q_l q_m q_n \qquad (u_i q_i = 0). \tag{75.13}$$

Anizotropia proprietăţilor piezorezistive a cristalelor semiconductoare se manifestă foarte puternic, aşa cum o confirmă suprafeţele efectului piezorezistiv longitudinal (fig. 75.1).

Pentru o cunoaştere mai amănunţită a fizicii efectului piezorezistiv şi a aplicaţiilor lui se pot consulta lucrările Mason (1967); Terston (1967); Mason (1966); Bir şi Pikus (1972).

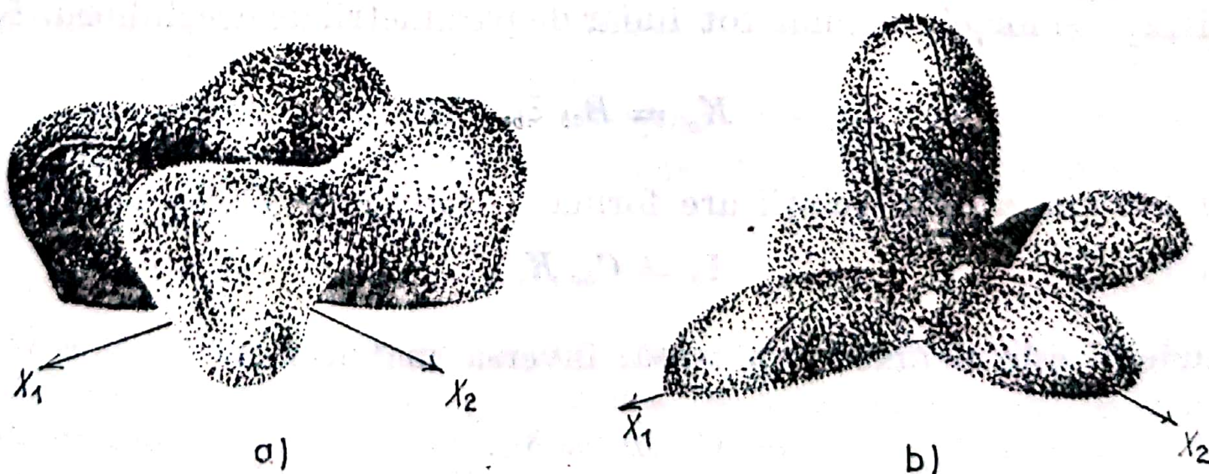


Fig. 75.1. Modele de suprafeţe ale efectului piezorezistiv longitudinal în cristalele de siliciu (clasa $m3m$): *a*) cristal de tipul *n*, $\rho = 11{,}7\ \Omega \cdot \text{cm}$; b) cristal de tipul *p*, $\rho = 7{,}8\ \Omega \cdot \text{cm}$. Acestea sînt jumătăţile superioare ale suprafeţelor; cele inferioare sînt reflexiile lor în oglindă (Butabaev şi Smîslov, 1971).

§ 76. PRINCIPIUL LUI ONSAGER ŞI EFECTELE TERMOGALVANOMAGNETICE

În termodinamica proceselor reversibile un rol important îl are principiul simetriei coeficienţilor cinetici, al lui Onsager (v. de Groot şi Masour, 1964; Haaze, 1967; Landau şi Lifşiţ, 1954, § 25; 1964, § 122; 1965, § 33). Fie ca abaterea de la starea de echilibru să se exprime prin parametrii ξ_a, care, în starea de echilibru, sînt egali cu zero. Viteza de revenire a sistemului în starea de echilibru este caracterizată, în aceşti termeni, de derivatele $-\dot{\xi}_a$. Viteza, evident, este cu atît mai mare cu cît sînt mai mari abaterile sistemului de la starea de echilibru, depinzînd, în prima aproximaţie, liniar de acestea

$$-\dot{\xi}_a = A_{ab}\,\xi_b. \tag{76.1}$$

Cantităţile $J_a = -\dot{\xi}_a$, în termodinamica proceselor ireversibile se numesc *fluxuri*, iar expresiile

$$K_a = -\frac{\partial S}{\partial \xi_a}, \tag{76.2}$$

în care S este entropia constituie *forţele conjugate fluxurilor respective**.

Ca şi fluxurile, forţele conjugate lor sînt diferite de zero doar în măsura în care sistemul se află într-o stare de neechilibru, dat fiind că la apropierea sistemului de starea de echilibru entropia sa creşte, astfel încît în starea de echilibru atinge valoarea maximă: cînd toţi $\xi_a = 0$, atunci toţi $\partial S/\partial \xi_a = 0$. Evident, în prima aproximaţie şi forţele depind tot liniar de parametrii de neechilibru, ξ_b

$$K_a = B_{ab}\,\xi_b.$$

Inversarea acestei relaţii are forma

$$\xi_b = C_{bc}\,K_c,$$

unde C este o matrice pătrată, inversă matricei B

$$C_{bc}\,B_{ca} = \delta_{ba}.$$

* Aceste „forţe" nu coincid în fond cu „forţele termodinamice generalizate", X_a, introduse în capitolul 7. Pentru a sublinia aceasta, notaţiile folosite sînt diferite (în lucrările asupra proceselor termodinamice ireversibile, menţionate mai sus, forţele asociate fluxurilor sînt notate cu litera X).

Fluxurile şi forţele conjugate lor sînt legate direct de viteza de creştere a entropiei în procesul apropierii sistemului de starea de echilibru. Într-adevăr,

$$\left(\frac{dS}{dt}\right)_{irev} = \frac{\partial S}{d\xi_a}\frac{\partial \xi_a}{dt} = K_a J_a. \qquad (76.3)$$

Trebuie să facem deosebire între viteza variaţiei ireversibile a entropiei, dată de formula (76.3), care, conform principiului al doilea al termodinamicii, este totdeauna pozitivă, şi viteza totală de variaţie a ei, care în cazul unei răciri suficient de intense a cristalului, poate fi şi negativă.

Se numesc *coeficienţi cinetici*, $\mathfrak{L}_{ac}$, coeficienţii dependenţei liniare a fluxurilor faţă de forţe

$$J_a = \mathfrak{L}_{ac} K_c; \qquad (76.4)$$

ei sînt legaţi de coeficienţii A şi C prin relaţiile

$$\mathfrak{L}_{ac} = A_{ab} C_{bc}.$$

Substituind în formula (76.3) valorile fluxurilor J_a, exprimate cu ajutorul relaţiei (76.4), obţinem

$$\left(\frac{dS}{dt}\right)_{irev} = \mathfrak{L}_{ab} K_a K_b. \qquad (76.5)$$

Deoarece viteza variaţiei ireversibile a entropiei în virtutea principiului al doilea al termodinamicii este totdeauna pozitivă, matricea $\mathfrak{L}$ este pozitiv definită.

Principiul simetriei coeficienţilor cinetici, al lui Onsager, constă în afirmaţia că matricea $\mathfrak{L}$, pe lîngă faptul că este pozitiv definită, este şi simetrică

$$\mathfrak{L}_{ac} = \mathfrak{L}_{ca}. \qquad (76.6)$$

Această formulare a principiului simetriei coeficienţilor cinetici este însă valabilă numai în măsura în care aceşti coeficienţi nu depind de cîmpul magnetic (sau, în general, cîmpul magnetic este absent). În cazul în care însă coeficienţii cinetici depind de cîmpul magnetic, $\boldsymbol{H}$, sînt valabile relaţii mai generale

$$\mathfrak{L}_{ac}(\boldsymbol{H}) = \mathfrak{L}_{ca}(-\boldsymbol{H}), \qquad (76.7)$$

relaţiile (76.6) reprezentînd cazul concret pentru $\boldsymbol{H} = 0$. Desigur că definirea pozitivă atît a relaţiilor (76.6) şi (76.7) este valabilă în aceeaşi măsură şi pentru matricea $\mathfrak{L}^{-1}$, care exprimă dependenţa liniară a forţelor faţă de fluxuri. În afară de aceasta, aici se presupune că mărimile $J_a = -\dot{\xi}_a$, denumite „fluxuri", îşi schimbă semnul în cazul inversiei timpului (aşa cum se întîmplă în cazul fluxurilor reale, de pildă fluxul de substanţă, fluxul de căldură, curentul electric). Formulările (76.6) şi (76.7) rămîn valabile şi dacă J_a şi J_c sînt ambele invariante la inversia timpului. Dacă însă la inversia timpului numai unul dintre ei îşi schimbă semnul, atunci formulările principiului Onsager, (76.6) şi (76.7), se înlocuiesc cu formulările inversate

$$\mathfrak{L}_{ac} = -\mathfrak{L}_{ca}, \tag{76.6'}$$

$$\mathfrak{L}_{ac}(\boldsymbol{H}) = -\mathfrak{L}_{ca}(-\boldsymbol{H}). \tag{76.7'}$$

Pentru a ilustra cum se aplică principiul lui Onsager în situaţii concrete, vom examina procesul trecerii simultane printr-un cristal a fluxului de căldură şi a curentului electric. El este determinat de un neechilibru esenţial al cristalului — de existenţa în acesta a gradientului de temperatură, grad T, şi a gradientului de potenţial, grad $\varphi = -\boldsymbol{E}$. Să notăm densitatea de curent electric cu $\boldsymbol{j}$, iar de flux de căldură cu $\boldsymbol{q}$. Densitatea fluxului total de energie va fi atunci $\boldsymbol{q} + \varphi\boldsymbol{j}$, în care φ este potenţialul, iar $\varphi\boldsymbol{j}$ este fluxul de energie, legat de curentul electric. Să calculăm viteza de variaţie a entropiei

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{S}}{\mathrm{d}t} = \int_V \frac{1}{T}\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{d}V = -\int_V \frac{\operatorname{div}(\boldsymbol{q}+\varphi\boldsymbol{j})}{T}\,\mathrm{d}V.$$

Observînd că $\operatorname{div}(\boldsymbol{q}+\varphi\boldsymbol{j}) = \operatorname{div}\boldsymbol{q} - \boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{E}$ (aici s-a ţinut cont că $\operatorname{div}\boldsymbol{j} = 0$), vom scrie această derivată sub forma

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{S}}{\mathrm{d}t} = -\int_V \frac{\operatorname{div}\boldsymbol{q}}{T}\,\mathrm{d}V + \int_V \frac{\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{E}}{T}\,\mathrm{d}V.$$

Transformăm prima integrală

$$-\int_V \frac{\operatorname{div}\boldsymbol{q}}{T}\,\mathrm{d}V = -\int_V \operatorname{div}\left(\frac{\boldsymbol{q}}{T}\right)\mathrm{d}V + \int_V \boldsymbol{q}\cdot\operatorname{grad}\left(\frac{1}{T}\right)\mathrm{d}V =$$

$$= \oint_\Sigma \frac{\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n}}{T}\,\mathrm{d}\Sigma - \int_V \frac{\boldsymbol{q}\cdot\operatorname{grad} T}{T^2}\,\mathrm{d}V.$$

Integrala de suprafață caracterizează, evident, acea parte a vitezei de variație a entropiei care este determinată de admisia căldurii din afară; din această cauză, ea trebuie exclusă din $(d\mathcal{S}/dt)_{irev}$. Astfel, spre deosebire de $d\mathcal{S}/dt$,

$$\left(\frac{d\mathcal{S}}{dt}\right)_{irev} = \int_V \left(-\frac{\boldsymbol{q}\cdot\operatorname{grad}T}{T^2} + \frac{\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{E}}{T}\right) dV,$$

sau, trecînd la mărimile calculate pe unitatea de volum a cristalului.

$$\left(\frac{d\mathcal{S}}{dt}\right)_{irev} = \boldsymbol{q}\cdot\left(-\frac{\operatorname{grad}T}{T^2}\right) + \boldsymbol{j}\cdot\frac{\boldsymbol{E}}{T}. \tag{76.8}$$

Fluxul de căldură, $\boldsymbol{q}$, și densitatea de curent, $\boldsymbol{j}$, este normal să fie considerate fluxuri; atunci compararea formulei (76.8) cu formula (76.3) arată că forțele conjugate lor sînt, respectiv, vectorii $-(1/T^2)\operatorname{grad} T$ și $(1/T)\boldsymbol{E} = -(1/T)\operatorname{grad} \varphi$.

Relația (76.4) este concretizată acum sub forma

$$q_i = \mathcal{L}_{il}\left(-\frac{1}{T^2}\frac{\partial T}{\partial x_l}\right) + \mathcal{L}_{i(3+m)}\left(\frac{E_m}{T}\right),$$

$$j_k = \mathcal{L}_{(3+k)l}\left(-\frac{1}{T^2}\frac{\partial T}{\partial x_l}\right) + \mathcal{L}_{(3+k)(3+m)}\left(\frac{E_m}{T}\right), \tag{76.9}$$

iar principiul simetriei coeficienților cinetici susține că matricea $\mathcal{L}$ este simetrică, adică $\mathcal{L}_{ab} = \mathcal{L}_{ba}$.

Dacă notăm

$$\frac{1}{T^2} = \mathcal{L}_{il} = \lambda^*_{il}, \qquad \frac{1}{T}\mathcal{L}_{(3+k)(3+m)} = \sigma_{km}, \qquad \frac{1}{T^2}\mathcal{L}_{(3+k)l} = \beta_{kl},$$

atunci, din principiul lui Onsager rezultă că

$$\lambda^*_{il} = \lambda^*_{li}, \quad \sigma_{km} = \sigma_{mk}, \quad \frac{1}{T}\mathcal{L}_{i(3+m)} = T\beta_{mi}$$

astfel încît (76.9) se scriu sub forma

$$q_i = -\lambda^*_{il}\frac{\partial T}{\partial x_l} + T\beta_{mi} E_m,$$
$$j_k = -\beta_{kl}\frac{\partial T}{\partial x_l} + \sigma_{km} E_m. \tag{76.10}$$

Prin urmare, λ^* este tensorul coeficienţilor de conductibilitate termică în absenţa cîmpului electric, iar σ este tensorul coeficienţilor rezistivităţii în absenţa gradientului termic; ambii tensori sînt pozitivi definiţi şi simetrici. Coeficienţii β_{kl} exprimă însă apariţia unui curent electric datorită existenţei în conductor a unui gradient de temperatură, adică efectul termoelectric. Tot ei exprimă fluxul termic care ia naştere în absenţa gradientului de temperatură, sub acţiunea cîmpului electric. Simetria internă a tensorului β este V^2.

În afară de aceasta, matricea $\mathfrak{L}$ este pozitiv definită. De aici rezultă, în particular, că elementele ei diagonale sînt pozitive, iar pătratele produselor nediagonale sînt mai mici decît pătratele produselor diagonale corespunzătoare (de comparat cu § 63); de exemplu,

$$\lambda^*_{11} > 0, \qquad \sigma_{33} > 0, \qquad \lambda^{*2}_{12} < \lambda^*_{11}\lambda^*_{22}, \qquad \sigma^2_{23} < \sigma_{22}\sigma_{33},$$
$$T\beta^2_{11} < \lambda^*_{11}\sigma_{11}, \qquad T\beta^2_{12} < \lambda^*_{22}\sigma_{11}.$$

Fenomenele termoelectrice din cristale sînt descrise de cele mai dese ori de ecuaţii de material echivalente cu (76.10), în care, însă drept variabile independente sînt luate grad T şi $\boldsymbol{j}$

$$E_i = \rho_{ik} j_k + \alpha_{im}\frac{\partial T}{\partial x_m},$$
$$q_l = T\alpha_{kl} j_k - \lambda_{lm}\frac{\partial T}{\partial x_m}. \tag{76.11}$$

Un calcul simplu arată că coeficienţii rezistivităţii, ρ_{ik}, coeficienţii de conductibilitate termică în absenţa curentului electric, λ_{lm}, şi coeficienţii termoelectrici, α_{kl}, sînt legaţi de coeficienţii σ_{km}, λ^*_{il}, β_{kl}, introduşi mai înainte, prin relaţiile

$$\rho_{ik}\sigma_{km} = \delta_{im}, \qquad \alpha_{im} = \rho_{ik}\beta_{km}, \qquad \lambda_{lm} = \lambda^*_{lm} - T\rho_{ik}\beta_{il}\beta_{km}.$$

Relația dintre coeficientul lui $\partial T/\partial x_n$ din prima dintre ecuațiile (76.11) și coeficientul lui j_k din a doua dintre ecuații poate fi dedusă și direct din principiul lui Onsager, considerînd formal drept „fluxuri" pe $\boldsymbol{E}$ și $\boldsymbol{q}$; atunci drept „forțe" vor apărea $(-1/T^2)$ grad T și $\boldsymbol{j}/T$. Însă întrucît în cazul inversiei timpului $\boldsymbol{q}$ își schimbă semnul, iar $\boldsymbol{E}$ nu și-l modifică, formularea principiului Onsager pentru coeficienți nu are forma (76.6), ci (76.6'); tocmai de aceea ei au același semn, nu semne contrare, ca în cazul coeficienților analogi din ecuația de material (76.10).

Simetria coeficienților cinetici, care depind de cîmpul magnetic, o vom analiza pe exemplul efectelor termogalvanomagnetice, adică a fenomenelor cinetice care apar într-un cristal prin care trece un flux termic și un curent electric, cînd este introdus într-un cîmp magnetic (asupra fizicii fenomenului termogalvanomagnetic se pot vedea amănunte, de pildă, în Vonsovski, 1981). Vom pleca de la o ecuație de material de tipul (76.11), limitîndu-ne la termenii liniari în cîmpul magnetic (evident, termenii pătratici analogi nu depind de cîmpul magnetic, cei cubici depind liniar etc.)

$$E_i = (\mathfrak{L}^{(0)}_{ik} + \mathfrak{L}^{(1)}_{ikn} H_n)\left(\frac{1}{T} j_k\right) + \\ + (\mathfrak{L}^{(0)}_{i(3+m)} + \mathfrak{L}^{(1)}_{i(3+m)n} H_n)\left(-\frac{1}{T^2}\frac{\partial T}{\partial x_m}\right),$$

$$q_l = (\mathfrak{L}^{(0)}_{(3+l)k} + \mathfrak{L}^{(1)}_{(3+l)kn} H_n)\left(\frac{1}{T} j_k\right) + \\ + (\mathfrak{L}^{(0)}_{(3+l)(3+m)} + \mathfrak{L}^{(1)}_{(3+l)(3+m)n} H_n)\left(-\frac{1}{T^2}\frac{\partial T}{\partial x_m}\right). \tag{76.12}$$

Folosind relația de simetrie (76.7'), vom realiza legătura dintre coeficienții

$$\mathfrak{L}^{(1)}_{abn} = (\partial \mathfrak{L}_{ab}/\partial H_n)_{H=0}$$

și coeficienții termogalvanomagnetici

$$\mathfrak{L}^{(1)}_{ikn} = -\mathfrak{L}^{(1)}_{kin} = -T\delta_{ikp} R_{pn},$$

$$\mathfrak{L}^{(1)}_{(3+l)(3+m)n} = -\mathfrak{L}^{(1)}_{(3+m)(3+l)n} = T^2 \delta_{lmp} L_{pn},$$

$$\mathfrak{L}^{(1)}_{i(3+m)n} = \mathfrak{L}^{(1)}_{(3+m)in} = T^2 N_{imn},$$

atunci ecuaţiile de material, (76.12), vor căpăta forma

$$E_i = \rho_{ik} j_k + \alpha_{im} \frac{\partial T}{\partial x_m} - \delta_{ikp} R_{pn} H_n j_k - N_{imn} H_n \frac{\partial T}{\partial x_m},$$

$$q_l = T\alpha_{kl} j_k - \lambda_{lm} \frac{\partial T}{\partial x_m} + T N_{kln} H_n j_k - \delta_{lmp} L_{pn} H_n \frac{\partial T}{\partial x_m}. \qquad (76.13)$$

Simetria internă şi denumirea tensorilor efectelor termogalvanomagnetice sînt următoarele:

$\mathbf{R} \sim V^2$ — tensorul coeficienţilor Hall;
$\mathbf{L} \sim V^2$ — tensorul coeficienţilor Leduc-Righi;
$\mathbf{N} \sim \varepsilon V^3$ — pseudotensorul coeficienţilor Nernst-Ettingshausen.

Ei determină: influenţa cîmpului magnetic asupra conductibilităţii electrice (efectul Hall), influenţa cîmpului magnetic asupra forţei termoelectromotoare (efectul Nernst) şi, legat de aceasta, influenţa cîmpului magnetic asupra fluxului termic creat de curentul electric ce trece prin conductor (efectul Ettingshausen) şi, în fine, influenţa cîmpului magnetic asupra conductibilităţii termice (efectul Leduc-Righi). În particular, pentru corpurile izotrope avem

$$R_{pn} = R\delta_{pn}, \qquad L_{pn} = L\delta_{pn}, \qquad N_{imn} = N\delta_{imn},$$

astfel încît ecuaţiile de material (76.13) capătă forma

$$\boldsymbol{E} = \rho \boldsymbol{j} + \alpha \operatorname{grad} T + R\boldsymbol{H} \times \boldsymbol{j} + N\boldsymbol{H} \times \operatorname{grad} T,$$

$$\boldsymbol{q} = T\alpha \boldsymbol{j} - \lambda \operatorname{grad} T + TN\boldsymbol{H} \times \boldsymbol{j} + L\boldsymbol{H} \times \operatorname{grad} T. \qquad (76.14)$$

Aşadar, într-un corp izotrop, pentru efectele termogalvanomagnetice, liniare în raport cu $\boldsymbol{H}$, este esenţială numai componenta magnetică perpendiculară pe curent, sau, respectiv, pe gradientul de temperatură, variaţia vectorilor intensitate a cîmpului electric şi a fluxului termic fiind, la rîndul lor, perpendiculare pe cîmpul magnetic care le-a determinat apariţia.

Efectul termoelectric şi efectul termogalvanomagnetic sînt tratate mai detaliat în Landau şi Lifşiţ (1957); principiul lui Onsager, aplicat în mod special la cristale (nemagnetice) precum şi fenomenele termoelectrice sînt tratate amănunţit de Nye (1967). În partea ce a mai rămas din acest paragraf, vom examina generalizarea noţiunilor introduse la cristalele magnetice.

Nu demult, s-a remarcat (Kleiner, 1966) că relaţiile (76.6) şi (76.7) pot fi interpretate ca o confirmare a faptului că la inversia timpului, $1'$, matricea coeficienţilor cinetici se transpune (în cazul în care sînt valabile relaţiile (76.6′) şi (76.7′), matricea coeficienţilor cinetici se transpune şi se înmulţeşte cu —1) drept care principiul simetriei coeficienţilor cinetici în tratarea sa iniţială este valabil numai în cazul corpurilor nemagnetice, în al căror grup de simetrie intră operaţia $1'$, pe cînd pentru cristalele magnetice vor fi necesare modificări corespunzătoare. Că formularea obişnuită, (76.6), a principiului simetriei coeficienţilor cinetici nu este valabilă pentru cristalele magnetice reiese clar chiar şi din faptul că influenţa asupra conductibilităţii electrice şi conductibilităţii termice a cristalelor magnetice, exercitată de momentul lor magnetic propriu, poate fi tratată drept efecte Hall şi Leduc-Righi spontane, care provoacă apariţia componentelor antisimetrice a tensorilor rezistenţei electrice şi conductibilităţii termice.

Prin urmare, procesele electro- şi termoconductoare din cristalele clasei magnetice 1 (precum şi $\bar{1}$ — vezi mai jos) sînt descrise de ecuaţiile

$$E_i = \rho_{ik}\, j_k + \alpha_{im}\frac{\partial T}{\partial x_m}$$

$$q_i = T\,\gamma_{ik}\, j_k - \lambda_{im}\frac{\partial T}{\partial x_m}, \tag{76.15}$$

în care ρ, α, γ, λ sînt nişte tensori de rangul doi nesimetrici în raport cu indicii, care nu sînt legaţi între ei prin nici un fel de relaţii, în afară de inegalităţile ce rezultă din definirea pozitivă a matricei coeficienţilor cinetici. Principiul lui Onsager are însă influenţă asupra formei acestor tensori numai în cazul prezenţei unei anumite simetrii magnetice; această influenţă se exprimă prin aceea că sub acţiunea rotaţiei R ele se transformă în $R\rho$, $R\alpha$, $R\gamma$ şi $R\lambda$, sub acţiunea inversiei timpului, $1'$, se transpune matricea $\mathfrak{L}$, iar sub acţiunea operaţiei $R' = 1'R$ are loc combinarea ambelor transformări. Totodată, pentru toate operaţiile g, care fac parte din grupul punctual al simetriei magnetice a cristalului, avem $g\mathfrak{L} = \mathfrak{L}$. În particular, pentru operaţiile de forma $R' = 1'R$, definite de matricea de rotaţie $\|r_{i'k}\|$, această condiţie înseamnă că componentele tensorilor ρ şi λ satisfac egalităţile

$$(r_{i'l}\, r_{j'k} - \delta_{i'k}\,\delta_{j'l})\,\rho_{kl} = 0, \tag{76.16}$$

iar componentele tensorilor α şi γ egalităţile

$$r_{i'l}\, r_{j'k}\,\alpha_{kl} = \delta_{i'k}\,\delta_{j'l}\,\gamma_{kl}. \tag{76.17}$$

Pe lîngă aceasta, trebuie să avem în vedere că tensorii ρ, λ, α, γ (ca şi pseudotensorii care descriu efectele termogalvanomagnetice) au centru de simetrie, din care cauză, sînt aceiaşi pentru toate grupurile magnetice care fac parte dintr-o clasă Laue, adică sînt reunite într-o aceeaşi celulă a coloanei G_1 din tabelul 72.4. Clasele Laue pentru grupurile magnetice, după cum se vede din acest tabel, se subîmpart în trei tipuri: albe, alb-negre şi cenuşii. În clasele Laue albe intră numai grupurile albe şi anume, toate. În clasele Laue cenuşii, alături de grupurile cenuşii, $G1'$, intră şi grupurile alb-negre, $G\bar{1}'$, printre elementele cărora există şi centrul de antisimetrie $\bar{1}'$. În sfîrşit, în clasele Laue alb-negre intră numai grupurile alb-negre, şi anume acelea dintre ele care nu conţin elementul $\bar{1}'$.

Din aceste consideraţii, pentru clasele cenuşii Laue, adică pentru grupurile $G1'$ şi $G\bar{1}'$, obţinem enunţul clasic al principiului lui Onsager

$$\rho_{ik} = \rho_{ki}, \quad \lambda_{ik} = \lambda_{ki}, \quad \gamma_{ik} = \alpha_{ki}$$

toţi aceşti tensori fiind invarianţi faţă de G. Pentru grupurile albe, G, tensorii ρ, λ, α, γ sînt invarianţi faţă de G, însă în general, ei nu sînt simetrici în raport cu indicii, nefiind în nici un fel legaţi între ei. Pentru clasele Laue alb-negre, cu ajutorul relaţiilor (76.16) şi (76.17), se deduc însă reguli speciale: acestea sînt cuprinse în tabelul 76.1.

Coeficienţii termogalvanomagnetici, adică pseudotensorii de rangul trei, care dau corecţiile coeficienţilor fundamentali, liniare în raport cu $\boldsymbol{H}$, se deduc analog (v. Kleiner, 1969). Cînd simetria lipseşte cu desăvîrşire,

$$E_i = \rho_{ik} j_k + \alpha_{im} \frac{\partial T}{\partial x_m} - P_{ikn} H_n j_k - N_{im} H_n \frac{\partial T}{\partial x_m},$$
$$q_l = T\gamma_{lk} j_k - \lambda_{lm} \frac{\partial T}{\partial x_m} - TM_{lkn} H_n j_k - Q_{lmn} H_n \frac{\partial T}{\partial x_m}. \tag{76.18}$$

Prin urmare, în acest caz, matricea $(\partial\mathfrak{L}/\partial\boldsymbol{H})_0$ este definită de patru pseudotensori de rangul trei, **P**, **Q**, **N** şi **M**, nelegaţi între ei şi care nu au nici un fel de simetrie internă. Deoarece inversia timpului, $1'$, nu numai că transpune matricea $(\partial\mathfrak{L}/\partial\boldsymbol{H})_0$, ci îi schimbă şi semnul, din faptul că în grupul de simetrie magnetică a unui cristal există operaţia $R' = 1'R$, rezultă relaţiile analoage cu (76.16), pentru tensorii **P** şi **Q**

$$(r_{i'm}\, r_{j'l}\, r_{k'n} + \delta_{i'l}\, \delta_{j'm}\, \delta_{k'n}) P_{lmn} = 0 \tag{76.19}$$

Tabelul 76.1

Coeficienţii cinetici ai proceselor de conductibilitate electrică şi de conductibilitate termică în cristalele magnetice din clasele Laue alb-negre

$2'/m'$	$\begin{matrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \rho_{12} & \rho_{22} & \rho_{23} & \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ -\rho_{13} & -\rho_{23} & \rho_{33} & \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \\ \alpha_{11} & \alpha_{21} & -\alpha_{31} & \lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{13} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & -\alpha_{32} & \lambda_{12} & \lambda_{22} & \lambda_{23} \\ -\alpha_{13} & -\alpha_{23} & \alpha_{33} & -\lambda_{13} & -\lambda_{23} & \lambda_{33} \end{matrix}$	$4'/mmm'$	$\begin{matrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & 0 & \alpha_{33} \\ \alpha_{22} & 0 & 0 & \lambda_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{11} & 0 & 0 & \lambda_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} & 0 & 0 & \lambda_{33} \end{matrix}$
$mm'm'$	$\begin{matrix} \rho_{11} & \rho_{12} & 0 & \alpha_{11} & \alpha_{12} & 0 \\ -\rho_{12} & \rho_{22} & 0 & \alpha_{21} & \alpha_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & 0 & \alpha_{33} \\ \alpha_{11} & -\alpha_{21} & 0 & \lambda_{11} & \lambda_{12} & 0 \\ -\alpha_{12} & \alpha_{22} & 0 & -\lambda_{12} & \lambda_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} & 0 & 0 & \lambda_{33} \end{matrix}$	$6'/m$	$\begin{matrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & \alpha_{12} & 0 \\ 0 & \rho_{11} & 0 & -\alpha_{12} & \alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & 0 & \alpha_{33} \\ \alpha_{11} & -\alpha_{12} & 0 & \lambda_{11} & 0 & 0 \\ \alpha_{12} & \alpha_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} & 0 & 0 & \lambda_{33} \end{matrix}$
∞/mm' $6/mm'm$ $4/mm'm'$ $\bar{3}m'$	$\begin{matrix} \rho_{11} & \rho_{12} & 0 & \alpha_{11} & \alpha_{12} & 0 \\ -\rho_{12} & \rho_{11} & 0 & -\alpha_{12} & \alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & 0 & \alpha_{33} \\ \alpha_{11} & \alpha_{12} & 0 & \lambda_{11} & \lambda_{12} & 0 \\ -\alpha_{12} & \alpha_{11} & 0 & -\lambda_{12} & \lambda_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} & 0 & 0 & \lambda_{33} \end{matrix}$	$6'/m'mm$	$\begin{matrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & 0 & \alpha_{33} \\ \alpha_{11} & 0 & 0 & \lambda_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{11} & 0 & 0 & \lambda_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} & 0 & 0 & \lambda_{33} \end{matrix}$
$4'/m$	$\begin{matrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & \alpha_{12} & 0 \\ 0 & \rho_{11} & 0 & \alpha_{21} & \alpha_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & 0 & \alpha_{33} \\ \alpha_{22} & -\alpha_{12} & 0 & \lambda_{11} & 0 & 0 \\ -\alpha_{21} & \alpha_{11} & 0 & 0 & \lambda_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} & 0 & 0 & \lambda_{33} \end{matrix}$	$m3m'$	$\begin{matrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{11} & 0 & 0 & \alpha_{11} \\ \alpha_{11} & 0 & 0 & \lambda_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{11} & 0 & 0 & \lambda_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{11} & 0 & 0 & \lambda_{11} \end{matrix}$

şi pentru **M** şi **N** relaţiile analoage relaţiilor (76.17)

$$-r_{i'm}\, r_{j'l}\, r_{k'n}\, N_{lmn} = \delta_{i'l}\, \delta_{j'm}\, \delta_{k'n}\, M_{lmn}. \qquad (76.20)$$

Folosind aceste relaţii se poate găsi forma matricei $(\partial \mathfrak{L}/\partial \boldsymbol{H})_0$ şi a pseudotensorilor care intră în ecuaţia (76.18), pentru toate clasele Laue alb-negre.

Dintre coeficienţii termogalvanomagnetici, cel mai mare interes îl prezintă, probabil, coeficienţii Hall. În timp ce în cristalele nemagnetice efectul Hall este descris de un tensor de rangul doi, **R** (în general nesimetric), în cristalele magnetice, pentru aceasta este nevoie de pseudotensorul nesimetric de rangul trei, **P**. Acesta este însă comod să-l descompunem într-o parte antisimetrică şi alta simetrică, în raport cu primii doi indici, partea antisimetrică putînd fi exprimată printr-un tensor de rangul doi

$$P_{ikn} = \delta_{ikp}\, R_{pn} + S_{ikn},$$

$$S_{ikn} = \frac{1}{2}(P_{ikn} + P_{kin}), \quad R_{pn} = \frac{1}{2}\, \delta_{pik}\, P_{ikn}.$$

Fiecare dintre aceste părţi, pentru orice clasă G de simetrie magnetică, poate fi uşor determinată din tabele. Evident, partea antisimetrică este invariantă nu numai în raport cu vechiul grup, $G\bar{1}$ al clasei Laue, căruia îi aparţine G, ci şi faţă de grupul $G11'$. Pentru el găsim din tabelul E.6 forma tensorului R, după care se pot reconstitui uşor şi $\delta_{ikp}R_{pn}$. Pentru a deduce forma părţii simetrice, trebuie să definim tensorul piezomagnetic pentru clasa Laue dată, $G\bar{1}$ (un procedeu simplu este expus în § 73), după care nu ne mai rămîne decît să permutăm indicii astfel încît indicii în raport cu care tensorul este simetric, să fie în faţă.

Termenii pătratici în $\boldsymbol{H}$ din funcţia care exprimă dependenţa rezistivităţii de cîmpul magnetic se introduc prin tensorul de rangul patru, **T**, astfel încît

$$E_i = (\rho_{ik} + P_{ikm} H_m + T_{ikmn} H_m H_n) j_k.$$

Tensorul $\boldsymbol{T}$ se numeşte *tensorul magnetorezistenţei*. El este, evident, totdeauna simetric în raport cu ultimii doi indici

$$T_{ikmn} = T_{iknm}. \tag{76.21}$$

În toate clasele Laue cenuşii el este totodată simetric şi în raport cu primii doi indici ($T_{ikmn} = T_{kimn}$), astfel încît forma sa poate fi găsită folosind tabelul E.19. În clasele Laue albe, tensorul **T** nu este, în general, simetric în raport cu primii doi indici; deci forma lui rămîne să fie determinată din tabelul E.21. În fine, forma tensorului magnetorezistenţei din clasele Laue alb-negre este determinată plecînd de la faptul că în cazul în care grupul de simetrie magnetică a cristalului conţine operaţia $R' = 1'R$, atunci

$$(r_{i'n}\, r_{j'm}\, r_{k'p}\, r_{l'q} - \delta_{i'm}\, \delta_{j'n}\, \delta_{k'p}\, \delta_{l'q})\, T_{mnpq} = 0, \tag{76.22}$$

ceea ce reprezintă analogul relaţiilor (76.16) şi (76.19). Forma tensorului magnetorezistenţei pentru toate cele 10 clase Laue cristalografice, alb-negre, care rezultă din relaţiile (76.21) şi (76.22) este dată de Pantulu şi Sudarshan (1970).

§ 77. EFECTUL ELECTROOPTIC ŞI EFECTUL PIEZOOPTIC

Modificările proprietăţilor optice ale cristalelor sub acţiunea cîmpului electric şi a tensiunilor mecanice au fost observate încă din secolul al XIX-lea, fiind folosite pe scară largă în practică.

Sub acțiunea cîmpului electric $\boldsymbol{E}$ și a tensiunilor mecanice, $\boldsymbol{\sigma}$, tensorul impermitivității dielectrice a cristalului, $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta}(\omega)$, variază extrem de puțin, căpătînd valoarea $\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\zeta}$, în care tensorul simetric de rangul doi, $\boldsymbol{\zeta} = \boldsymbol{\zeta}(\boldsymbol{E}, \boldsymbol{\sigma})$, reprezintă o creștere infinit mică a tensorului impermitivității dielectrice (v. § 20). Deoarece suprafața caracteristică a tensorului impermitivității dielectrice, $\boldsymbol{\eta}$, este indicatricea optică

$$\eta_{ij}\, x_i\, x_j = 1,$$

efectele pe care le studiem le putem reprezenta intuitiv ca rezultat al deformării indicatricei optice a cristalului sub acțiunea cîmpului electric sau al tensiunilor mecanice.

Variația impermitivității dielectrice a unor substanțe sub acțiunea tensiunilor mecanice cu frecvențe optice se numește *efect piezooptic*, sau *fotoelasticitate* (efectul piezooptic a fost descoperit de Brewster, la început la corpurile izotrope transparente, iar mai apoi și la cristale — Brewster, 1818). În cazul cristalelor, o precizie suficientă este dată de aproximația de ordinul întîi, liniară

$$\boldsymbol{\zeta} = \boldsymbol{\pi} : \boldsymbol{\sigma}, \quad \zeta_{ij} = \pi_{ijkl}\, \sigma_{kl}. \tag{77.1}$$

Tensorul de rangul patru, $\boldsymbol{\pi}$, se numește *tensorul coeficienților piezooptici*. Deoarece tensorul $\boldsymbol{\zeta}$ este simetric, tensorul $\boldsymbol{\pi}$ este simetric în raport cu prima pereche de indici, iar datorită simetriei lui $\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\pi}$ este simetric și în raport cu a doua pereche. Prin urmare,

$$\pi_{ijkl} = \pi_{jikl} = \pi_{ijlk} = \pi_{jilk}, \tag{77.2}$$

adică simetria lui interioară va fi $[V^2]^2$. Efectul piezooptic este posibil în mediile cu orice simetrie, inclusiv în corpurile izotrope. Forma generală a tensorului coeficienților piezooptici într-un sistem de coordonate cristalofizic este dată, pentru cristalele tuturor claselor, în tabelul E.19. În acest caz, componentele $\pi_{\lambda\mu}$ corespund exprimării efectului piezooptic sub forma

$$\zeta_\lambda = \pi_{\lambda\mu}\, \sigma_\mu, \tag{77.3}$$

în care se ia

$$\zeta_\lambda = \zeta_{ij} \qquad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots, 6),$$

$$\sigma_\mu = \sigma_{kl} \qquad (kl \leftrightarrow \mu = 1, \ldots, 6). \tag{77.4}$$

De aici obţinem (v. anexa F) regulile pentru transcrierea în noile notaţii

$$\pi_{\lambda\mu} = \begin{cases} \pi_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots, 6\,;\ kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2\pi_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots, 6\,;\ kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6). \end{cases} \qquad (77.5)$$

Variaţia tensorului impermitivităţii dielectrice se poate exprima şi prin deformaţii

$$\zeta = \mathbf{p} : \varepsilon, \quad \zeta_{ij} = p_{ijkl}\, \varepsilon_{kl}. \qquad (77.6)$$

Tensorul **p** se numeşte *tensorul coeficienţilor elastooptici*. Simetria lui internă coincide cu simetria internă a tensorului $\boldsymbol{\pi}$. În scrierea contrasă, formula (77.6) capătă forma

$$\zeta_\lambda = p_{\lambda\mu}\, \varepsilon_\mu. \qquad (77.7)$$

Plecînd de la regulile de exprimare în noile notaţii pentru ζ_λ, (77.4), şi pentru ε_μ, (F.4), obţinem

$$p_{\lambda\mu} = p_{ijkl} \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots, 6\,;\ kl \leftrightarrow \mu = 1, \ldots, 6). \qquad (77.8)$$

Forma generală a tensorului coeficienţilor elastooptici într-un sistem de coordonate cristalofizic, pentru cristalele tuturor claselor, este dată în tabelul E.19; unele deosebiri dintre relaţiile care leagă între ei coeficienţii lui $\pi_{\lambda\mu}$ de ai lui $p_{\lambda\mu}$ se explică prin diferenţa ce există între regulile de calcul pentru a trece la noile notaţii în (77.5) şi (77.8). Coeficienţii elastooptici, pentru cîteva cristale, sînt daţi în tabelul 77.1.

Tabelul 77.1

Coeficienţii elastooptici, $p_{\lambda\mu}$, ai unor cristale

Cristalul	Clasa	Indicii $\lambda\mu$							
		11	33	4	12	13	14	31	41
Diamant	$m3m$	−0,31		−0,012	−0,09				
NaCl	$m3m$	0,137		−0,108	0,178				
KCl	$m3m$	0,211		0,024	0,156				
$NaBrO_3$	$m3$	0,185		−0,0139	0,218	0,213			
$NaClO_3$	$m3$	0,173		−0,0187	0,258	0,223			
Safir	$\bar{3}m$	−0,23	−0,20	−0,10	−0,03	0,02	0,00	−0,04	0,00
$LiNbO_3$	$3m$	0,034	0,094	0,30	0,072	0,096	0,066	0,178	0,154
Calcit	$\bar{3}m$	0,095	0,178	−0,090	0,189	0,215	−0,006	0,309	0,01
Cuarţ α	32	0,137	0,0973	−0,0685	0,249	0,258	−0,029	0,257	−0,042
Cuarţ topit	$\infty\infty m$	0,121		−0,075	0,270				

Întrucît deformările elastice şi tensiunile sînt legate între ele prin legea lui Hooke,

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{s} : \boldsymbol{\sigma}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c} : \boldsymbol{\varepsilon},$$

se poate stabili uşor legătura dintre coeficienţii piezooptici şi coeficienţii elastooptici

$$p_{\lambda\mu} = \pi_{\lambda\nu} c_{\nu\mu}, \quad \pi_{\lambda\mu} = p_{\lambda\nu} s_{\nu\mu}. \tag{77.9}$$

Cînd un cristal este supus nu numai deformărilor elastice, ci şi deformărilor plastice, situaţia se complică. Markovski, Poluhin şi Şaskolskaia (1966) au arătat pe exemplul monocristalelor de clorură de argint, deformate plastic, că pentru acest material şi în domeniul plastic, pînă la deformări de inclusiv 20%, are loc o dependenţă liniară a variaţiei tensorului impermitivităţii dielectrice $\boldsymbol{\eta}$ în funcţie de tensorul tensiunilor, $\boldsymbol{\sigma}$, ce se poate exprima prin relaţiile (77.1) şi (77.3) şi chiar cu aceiaşi coeficienţi, pe cînd formulele (77.6) şi (77.7) nu mai sînt valabile: deformările indicatricei optice sînt determinate nu de deformarea totală, $\boldsymbol{\varepsilon}$, ci numai de partea elastică a acesteia.

Tensorul coeficienţilor elastooptici, $\mathbf{p}$, joacă un rol important în efectul Mandelştam-Brillouin, adică în împrăştierea luminii pe vibraţiile elastice termice ale cristalului (împrăştierea luminii în cristale este studiată în monografia lui Fabelinski (1965)). O undă elastică (hipersonoră) cu deplasarea

$$\boldsymbol{u} = A\boldsymbol{p} \exp [(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r} - vt)]$$

(v. §56), deformînd un cristal provoacă o variaţie a indicatricei optice de forma

$$\zeta_{ij}(\varepsilon) = p_{ijkl}\varepsilon_{kl},$$

în care tensorul micilor deformaţii este

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2}(\partial u_k/\partial x_l + \partial u_l/\partial x_k).$$

În acest caz, datorită simetriei tensorului coeficienţilor elastooptici, p_{ijkl}, în raport cu ultimii doi indici, $\zeta_{ij}(\varepsilon)$ poate fi exprimat sub forma

$$\zeta_{ij}(\varepsilon) = p_{ijkl}\frac{\partial u_k}{\partial x_l}. \tag{77.10}$$

Împrăştierea Mandelştam-Brillouin reprezintă în fond o difracţie a luminii pe o structură periodică,

$$\zeta_{ij} = Z_{ij} \exp [(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r} - vt)],$$

însoțită de efectul Doppler, determinată de mișcarea acestei structuri cu viteza hipersunetului, v. Nu demult s-a remarcat (Nelson, Lax, 1970) că rotațiile elementelor unui volum al cristalului considerat ca un întreg, provocate de o undă elastică,

$$\omega_{kl} = (A\pi i/\lambda)(p_k m_l - m_k p_l) \exp[2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r} - vt)],$$

în cazul prezenței unei duble refracții naturale nu prea mici a cristalului, dau o contribuție sesizabilă la împrăștierea Mandelștam-Brillouin. Într-adevăr, în cazul unor asemenea rotații, indicatricea optică a elementului de volum se rotește împreună cu acesta. Coeficienții indicatricei optice rotite astfel față de sistemul de coordonate imobil, adică de sistemul legat de întregul cristal, sînt egali cu

$$\eta^{\star}_{ij} = c_{k'i}\, c_{l'j}\, \eta_{k'l'},$$

în care $\eta_{k'l'}$ sînt coeficienții indicatricei optice, raportați la sistemul rotit, iar $c_{k'i}$ sînt elementele matricei de transformare. Deoarece, conform formulei (17.7), pentru un unghi de rotație mic

$$c_{k'i} = \delta_{k'i} + \delta_{k'ij}\,\varphi_j,$$

tensorul micilor rotații fiind legat de unghiul de rotație prin relația

$$\omega_{ki} = -\delta_{kij}\varphi_j$$

ce rezultă direct din formula (49.6), coeficienții căutați ai indicatricei optice rotite vor fi egali cu

$$\eta^{\star}_{ij} = (\delta_{ki} - \omega_{ki})(\delta_{lj} - \omega_{lj})\,\eta_{kl}. \qquad (77.11)$$

Indicii de însumare cu semnul prim au fost înlocuiți aici prin indicii fără acest semn; firește, aceasta nu modifică suma, însă este mai comodă pentru interpretare: prin η_{kl} se subînțeleg coeficienții indicatricei optice a cristalului în absența acțiunilor exterioare, raportate la sistemul de coordonate imobil. Variațiile componentelor tensorului impermitivității dielectrice, determinate de rotație, sînt egale cu

$$\zeta_{ij}(\omega) = \eta^{\star}_{ij} - \eta_{ij}.$$

Înlocuind aici valoarea lui $\eta^{\star}_{ij}$ din formula (77.11) și neglijînd termenii pătratici în ω, obținem

$$\zeta_{ij}(\omega) = -\eta_{il}\,\omega_{lj} - \eta_{kj}\,\omega_{kl}.$$

Avînd în vedere antisimetria tensorului $\boldsymbol{\omega}$, acest rezultat poate fi scris sub forma

$$\zeta_{ij}(\omega) = (\eta_{il}\,\delta_{jk} - \eta_{kj}\,\delta_{il})\,\omega_{kl}.$$

Să facem tensorul $\eta_{il}\delta_{jk} - \eta_{kj}\delta_{il}$ antisimetric în raport cu indicii k și l. Notînd rezultatul antisimetricizării cu $q_{ij[kl]}$, obținem

$$q_{ij[kl]} = \frac{1}{2}(\eta_{il}\,\delta_{jk} - \eta_{kj}\,\delta_{il} + \eta_{lj}\,\delta_{ik} - \eta_{ik}\,\delta_{lj}). \qquad (77.12)$$

La înmulțirea tensorului $q_{ij[kl]}$ cu ω_{kl} se obține același rezultat ca și pentru $\eta_{il}\,\delta_{jk} - \eta_{kj}\,\delta_{il}$, însă

$$q_{ij[kl]}\ \varepsilon_{kl} = 0,$$

de aceea, $\zeta_{ij}(\omega)$ poate fi calculat și din distorsiunea $\partial \boldsymbol{u}/\partial \boldsymbol{r}$

$$\zeta_{ij}\ (\omega) = q_{ij[kl]}\ \frac{\partial u_k}{\partial x_l}, \qquad (77.13)$$

Comparînd (77.10) cu (77.13) vedem că se poate forma un tensor generalizat al coeficienților elastooptici, nesimetric în raport cu ultimii indici

$$q_{ijkl} = p_{ijkl} + q_{ij[kl]} \qquad (77.14)$$

(tensorul obișnuit al coeficienților elastooptici, **p**, este în acest caz partea simetrică: $p_{ijkl} = q_{ij(kl)}$) și cu ajutorul lui să exprimăm variațiile totale ale coeficienților indicatricei optice,

$$\zeta = \zeta(\varepsilon) + \zeta(\omega)$$

sub forma

$$\zeta_{ij} = q_{ijkl}\ \frac{\partial u_k}{\partial x_l}, \quad \zeta = \mathbf{q} : \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{r}}. \qquad (77.15)$$

Remarcăm că tensorul $q_{ij[kl]}$ nici măcar nu este definit de întregul tensor **q**, ci numai cu deviatorul lui, din care cauză tensorul **q** nu are în general $6 \cdot 9 = 54$ componente independente, cum ar trebui să fie în cazul unui tensor cu simetria internă $[V^2]\ V^2$, ci numai 41; cu 5 mai multe decît tensorul **p**, de simetrie internă $[V^2]^2$.

Să examinăm acum efectul cîmpului electric asupra indicatricei optice a cristalului. Vom începe cu efectul electrooptic liniar, denumit și *efectul Pockels* (Pockels, 1894). El este descris de formula

$$\zeta = \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{E}, \quad \zeta_{ij} = r_{ijk}\ E_k. \qquad (77.16)$$

Tensorul de rang trei, **r**, se numește *tensorul coeficienților electrooptici.* Datorită simetriei tensorului ζ, simetria internă a tensorului **r** este aceeași cu a tensorului coeficienților piezoelectrici, **d**. Rezultă clar deci că efectul electrooptic liniar este posibil numai în acele cristale a căror simetrie permite existența proprietăților piezoelectrice. Scrierea contrasă a formulei (77.16) este de forma

$$\zeta_\lambda = r_{\lambda k}\ E_k; \qquad (77.17)$$

conform relației (77.4), regula de transcriere, în noile notații, va fi

$$r_{\lambda k} = r_{ijk} \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots, 6). \qquad (77.18)$$

Forma generală a tensorului **r** pentru toate clasele cristalografice este dată în tabelul E.11, iar valorile pentru unele cristale, în tabelul 77.2.

Tabelul 77.2

Coeficienţii electrooptici, $r_{\mu k}$, ai unor cristale ($\lambda = 546$ nm), în 10^{-8} unit. CGSel

Cristalul	Clasa	Indicii μk					
		13	22	33	41	42	63
CuCl	$\bar{4}3m$				18,3		
ZnS	$\bar{4}3m$				6,0		
KDP	$\bar{4}2m$				26,0		32,0
ADP	$\bar{4}2m$				72,0		26,0
CdS	$6mm$	3,3		7,2		11,1	
$Ba_2NaNb_5O_{15}$	$4mm$	54,0		170,0		45,0	
$LiNbO_3$	$3m$	25,8	12,0	92,4		84,0	

Coeficienţii electrooptici depind, în general, de condiţiile de măsurare. Importanţă practică au două situaţii: 1) tensiunile mecanice sînt egale cu zero (cristalul este liber din punct de vedere mecanic şi se poate deforma datorită efectului piezoelectric invers) — coeficienţii electrooptici corespunzători îi vom nota cu $\mathbf{r}^{(\sigma)}$; 2) cristalul este total lipsit de posibilitatea de a se deforma (este fixat mecanic) — acestui caz îi corespund coeficienţii $\mathbf{r}^{(\varepsilon)}$. Pentru a calcula diferenţa $\mathbf{r}^{(\sigma)} - \mathbf{r}^{(\varepsilon)}$, vom studia acţiunea simultană a efectelor electrooptic şi piezooptic precum şi deformările care iau naştere în cristal sub acţiunea cîmpului electric şi a cîmpului tensiunilor mecanice

$$\zeta_\lambda = r_{\lambda k} E_k + \pi_{\lambda\mu} \sigma_\mu,$$
$$\varepsilon_\varkappa = d_{k\varkappa} E_k + s_{\varkappa\mu} \sigma_\mu. \tag{77.19}$$

Aici **d** şi **s** sînt tensorii coeficienţilor piezoelectrici şi ai coeficienţilor deformabilităţii elastice. Cînd cristalul este fixat mecanic, $\varepsilon = 0$, astfel încît,

$$\sigma_\mu = - c_{\mu\varkappa} d_{k\varkappa} E_k.$$

Din această cauză, într-un cristal fixat mecanic corecţia electrooptică la tensorul impermitivităţii dielectrice este egală cu

$$\zeta_\lambda = (r_{\lambda k}^{(\sigma)} - d_{k\varkappa} c_{\varkappa\mu} \pi_{\lambda\mu}) E_k. \tag{77.20}$$

Evident, expresia din paranteză reprezintă tocmai coeficienţii electrooptici ai unui cristal fixat mecanic. Folosindu-ne de formula (77.9) putem exprima relaţia dintre coeficienţii electrooptici ai unui cristal liber şi cînd este fixat mecanic sub forma

$$r_{\lambda k}^{(\sigma)} - r_{\lambda k}^{(\varepsilon)} = d_{k\varkappa}\, p_{\lambda\varkappa}. \qquad (77.21)$$

După cum s-a menţionat deja, efectul electrooptic liniar este posibil numai în cristalele care fac parte din clasele de simetrie piezoelectrică. În acelaşi timp însă, dubla refracţie artificială sub acţiunea cîmpului electric se observă şi la substanţele a căror simetrie exclude, evident, posibilitatea efectului piezoelectric, în particular, în corpurile izotrope — în lichide şi chiar în gaze. În toate aceste cazuri însă efectul este proporţional nu cu intensitatea cîmpului electric, ci cu pătratul ei, fără să se modifice la schimbarea sensului cîmpului electric în sens contrar. Acesta este *efectul electrooptic pătratic*, sau *efectul Kerr*.

Corecţia la tensorul impermitivităţii dielectrice, determinată de efectul electrooptic pătratic, are forma

$$\zeta_{ij} = K_{ijkl}\, E_k\, E_l, \quad \zeta_\lambda = K_{\lambda\mu}(\boldsymbol{EE})_\mu, \qquad (77.22)$$

în care regulile de retranscriere pentru ζ_λ sînt date de formula (77.4), iar pentru $(\boldsymbol{EE})_\mu$, de formula

$$(\boldsymbol{EE})_\mu = E_k\, E_l \quad (kl \leftrightarrow 1, \ldots, 6). \qquad (77.23)$$

Tensorul de rangul patru, **K**, se numeşte *tensorul coeficienţilor Kerr*; simetria lui internă este aceeaşi ca şi simetria internă a tensorului coeficienţilor piezooptici, π; mai mult decît atît, în cazul acestor tensori, coincid şi regulile de retranscriere în noile notaţii

$$K_{\lambda\mu} = \begin{cases} K_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots, 6;\ kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2K_{ijkl} & (ij \leftrightarrow = 1, \ldots, 6;\ kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6) \end{cases} \qquad (77.24)$$

(de comparat cu (77.5)). De aceea, forma generală a tensorului coeficienţilor Kerr, într-un sistem de coordonate cristalofizic, este dată pentru cristalele tuturor claselor de acelaşi tabel, E.19, ca şi forma generală a tensorului coeficienţilor piezooptici.

Efectul electrooptic pătratic se poate observa şi la cristalele în care se manifestă efectul electrooptic liniar. În majoritatea cazurilor el contribuie doar cu mici adausuri la efectul liniar, principal; dacă însă cîmpul electric este aplicat experimental

după o direcţie, astfel încît nu determină apariţia unui efect electrooptic liniar, atunci efectul electrooptic pătratic devine determinant.

§ 78. ANIZOTROPIA OPTICĂ ARTIFICIALĂ A CRISTALELOR

Cristale uniaxe şi cristale biaxe artificiale. Să examinăm modul în care, sub influenţa acţiunilor exterioare, se modifică indicatricea optică; cu alte cuvinte, cum se schimbă proprietăţile optice ale cristalului ca un întreg.

Mediile optic izotrope — cristalele sistemului cubic şi corpurile izotrope — pot ca în urma unor acţiuni exterioare să rămînă optic izotrope, dar pot şi să devină asemenea cristalelor uniaxe sau biaxe, ceea ce se vede imediat din figura conoscopică (v. § 40). Primul caz se realizează ca rezultat al unei presiuni exterioare din toate direcţiile, p. În acest caz tensorul ζ este izotrop.

Cînd acţiunea exterioară transformă mediul optic izotrop în analogul unui cristal uniax, simetria tensorului ζ este egală cu ∞/mm; pentru aceasta, mediul deformat trebuie să-şi păstreze o axă de simetrie de ordinul trei sau de un ordin mai înalt. Înseamnă că pentru a se atribui unui mediu izotrop anizotropia optică a unui cristal uniax este suficient ca acest cristal să fie supus acţiunii unui cîmp electric orientat arbitrar sau unei tensiuni uniaxe. Într-un cristal dintr-un subsistem superior din sistemul cubic, cîmpul electric sau tensiunea uniaxă trebuie orientate după una dintre axele de ordinul trei sau de ordinul patru, adică după direcţiile ⟨111⟩ sau ⟨100⟩, iar într-un cristal dintr-un subsistem inferior sistemului cubic, după axa de ordinul trei, ⟨111⟩.

Tensiunile mecanice care nu se reduc la o comprimare hidrostatică sau la o tensiune uniaxă, acţionînd asupra unui corp izotrop îl transformă din punct de vedere al proprietăţilor optice în analogul unui cristal uniax. În cristalele din sistemul cubic acelaşi efect îl are şi întinderea uniaxă sau cîmpul electric, orientate după o direcţie diferită de direcţiile axelor de ordinul trei sau de ordinul patru.

Să examinăm, de exemplu, modificarea proprietăţilor optice ale unui cristal dintr-un subsistem inferior al sistemului cubic, sub acţiunea unei tensiuni uniaxe de intensitate σ, orientată după [001] — la aceste cristale, [001] este axă de ordinul doi. Corecţia la tensorul impermitivităţii dielectrice este egală cu

$$\zeta = \pi : \sigma e_3 e_3 = (\pi_{21} e_1 e_1 + \pi_{12} e_2 e_2 + \pi_{11} e_3 e_3)\sigma, \qquad (78.1)$$

unde e_1, e_2, e_3 sînt versorii sistemului de coordonate cristalofizic. Axele principale ale tensorului variabil al impermitivității dielectrice coincid cu acești versori. Pentru analiza pe care o întreprindem este util să stabilim care anume dintre indicii de refracție principali este cel mai mare și care este cel mai mic. Astfel, în cazul alaunurilor de potasiu, azotatului de bariu și azotatului de plumb,

$$\pi_{11} < \pi_{21} < \pi_{12};$$

de aceea,

$$N_g^{-2} = N_3^{-2} = n_0^{-2} + \pi_{11}\sigma,$$

$$N_m^{-2} = N_1^{-2} = n_0^{-2} + \pi_{21}\sigma, \tag{78.2}$$

$$N_p^{-2} = N_2^{-2} = n_0^{-2} + \pi_{12}\sigma.$$

Așadar, axele optice ale cristalului tensionat se află în planul (100), fiecare dintre ele făcînd cu axa [001] un unghi V, care este dat de formula

$$\operatorname{tg} V = \sqrt{\frac{N_p^{-2} - N_m^{-2}}{N_m^{-2} - N_g^{-2}}}$$

(v. § 35). Înlocuind în această formulă inversele pătratelor indicilor de refracție principali, găsim

$$\operatorname{tg} V = \sqrt{\frac{\pi_{12} - \pi_{21}}{\pi_{21} - \pi_{11}}}. \tag{78.3}$$

În ciuda faptului că indicii principali depind de intensitatea acțiunii exterioare, unghiul dintre axele optice nu depinde de ea; el este determinat de caracterul și orientarea acțiunii și de proprietățile piezooptice (sau, respectiv, electrooptice) ale cristalului.

Să analizăm acum cristalele uniaxe. Ele rămîn uniaxe atît într-un cîmp electric orientat după axa principală de simetrie, cît și sub acțiunea unei întinderi uniaxe de aceeași direcție și a comprimării hidrostatice. Oricare alte solicitări transformă aceste cristale în analoagele cristalelor biaxe.

Pentru a evalua birefringența artificială, vom evalua jumătate din unghiul dintre axele optice ale cristalului tensionat. Să utilizăm pentru aceasta rezultatele obținute în § 20. Anume, vom presupune că tensorul mic ζ (în comparație cu η) este scris într-un sistem de coordonate cristalofizic. Să notăm cu $\xi_{(1)}$ și cu $\xi_{(2)}$ ($\xi_{(1)} > \xi_{(2)}$) valorile proprii ale tensorului bidimensional

$$\begin{Vmatrix} \zeta_{11} & \zeta_{12} \\ \zeta_{12} & \zeta_{22} \end{Vmatrix}.$$

Presupunînd, pentru fixarea ideilor, că cristalul tensionat este optic pozitiv, avem

$$N_g^{-2} = N_e^{-2} + \zeta_{33},$$
$$N_m^{-2} = N_o^{-2} + \xi_{(2)}, \qquad (78.4)$$
$$N_p^{-2} = N_o^{-2} + \xi_{(1)}.$$

Atunci jumătatea unghiului dintre axele optice este

$$V \approx \operatorname{tg} V = \sqrt{\frac{\xi_{(1)} - \xi_{(2)}}{N_o^{-2} - N_e^{-2}}}. \qquad (78.5)$$

Prin urmare, cristalul rămîne pozitiv și cînd este solicitat ($V \ll 45°$). Substituind în formula (78.5) valoarea diferenței $\xi_{(1)} - \xi_{(2)}$, obținem

$$\operatorname{tg} V = \frac{\sqrt[4]{(\zeta_{11} - \zeta_{22})^2 + (2\zeta_{12})^2}}{\sqrt{N_o^{-2} - N_e^{-2}}}. \qquad (78.6)$$

Dacă birefringența artificială este provocată de efectul piezooptic atunci

$$\operatorname{tg} V = \frac{\sqrt[4]{[(\pi_{1\mu} - \pi_{2\mu})\,\sigma_\mu]^2 + (2\pi_{6\mu}\,\sigma_\mu)^2}}{\sqrt{N_o^{-2} - N_e^{-2}}}, \qquad (78.7)$$

iar dacă este creată de efectul electrooptic, atunci

$$\operatorname{tg} V = \frac{\sqrt[4]{[(r_{1k} - r_{2k})\,q_k]^2 + (2r_{6k}\,q_k)^2}}{\sqrt{N_o^{-2} - N_e^{-2}}}, \qquad (78.8)$$

unde $\boldsymbol{E} = E\boldsymbol{q}$ este intensitatea cîmpului electric. Sînt ușor de scris formulele analoage și pentru cristalele negative.

Să vedem care sînt deosebirile dintre birefringența artificială în cristalele uniaxe și birefringența artificială în cristalele optic izotrope. În cristalele uniaxe unghiul dintre axele optice este mic și depinde de intensitatea solicitării; astfel, în cazul efectului piezooptic el este proporțional cu $\sqrt{\sigma}$, în cazul efectului electrooptic, cu $\sqrt{E}$, iar în cazul efectului Kerr, cu $|E|$. În cristalele

optic izotrope acest unghi nu este, în general, mic și nici nu depinde de intensitatea solicitărilor. Pe măsura micșorării treptate a solicitării aplicate unui cristal cubic, ieșirile axelor optice în figura conoscopică nu se deplasează, însă toate izocromele se lărgesc treptat și ies din cîmpul vizual. Dimpotrivă, în cazul micșorării solicitării aplicate unui cristal uniax, ieșirile axelor optice din figura conoscopică se apropie la început mai încet, iar apoi din ce în ce mai repede, pînă la contopirea totală, pe cînd numărul izocromelor care formează figura conoscopică practic nu se modifică, deoarece, în acest caz, el este determinat de dubla refracție naturală a cristalului. Prin urmare, unghiul dintre axele optice, în cazul birefringenței artificiale, caracterizează intensitatea solicitării numai pentru cristalele uniaxe.

Dubla refracție artificială este provocată, în particular, și de tensiunile interioare, care iau naștere în cristale în procesul de creștere.

Birefringența artificială. Se numește birefringență artificială modificarea birefringenței cristalelor sub acțiunea solicitărilor exterioare, de pildă, a tensiunilor mecanice sau a cîmpului electric, în particular apariția dublei refracții în cristale sau după direcții în care aceasta nu exista în absența acțiunilor exterioare.

Fie direcția de propagare a luminii astfel încît în absența unui cîmp electric sau a tensiunilor mecanice birefringența să lipsească (în cristalele din categoriile inferioară și medie o asemenea proprietate au axele optice, iar în cristalele din categoria superioară și în corpurile izotrope orice direcție). Sub acțiunea cîmpului electric sau a tensiunilor mecanice va apărea după această direcție o dublă refracție artificială. Să calculăm mărimea ei, avînd în vedere că creșterea ζ a tensorului impermitivității dielectrice, η, datorită solicitărilor exterioare, este mică.

Să introducem un sistem de coordonate cartezian special, $X_1'X_2'X_3'$, orientînd axa X_3' după normala la undă; atunci axele X_1' și X_2' se vor afla în planul frontului de undă. Secțiunea centrală cu planul frontului de undă a indicatricei optice este dată în sistemul de coordonate special de ecuațiile

$$\eta'_{\alpha\beta}x'_\alpha x'_\beta = 1 \quad (\alpha, \beta = 1, 2), \quad x'_3 = 0, \tag{78.9}$$

care reprezintă un cerc de rază n_o, n_o fiind indicele de refracție a luminii cînd se propagă după axa optică în cristalul liber. Întradevăr, axa X_3' coincide cu axa optică și deci

$$\eta'_{11} = \eta'_{22} = n_o^{-2}, \quad \eta'_{12} = 0, \tag{78.10}$$

astfel încît prima dintre ecuațiile (78.9) se reduce la

$$n_o^{-2}[(x'_1)^2 + (x'_2)^2 = 1.$$

Indicatricea optică perturbată este descrisă de ecuația

$$\boldsymbol{r}(\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\zeta})\cdot\boldsymbol{r} = 1, \quad (\eta_{ij} + \zeta_{ij})x_i\, x_j = 1, \tag{78.11}$$

pe cînd secțiunea sa centrală cu planul frontului de undă, de ecuațiile

$$(\eta'_{\alpha\beta} + \zeta'_{\alpha\beta})x'_\alpha x'_\beta = 1 \quad (\alpha, \beta = 1, 2), \quad x_3 = 0. \tag{78.12}$$

Ținînd cont de relația (78.10), vom scrie prima dintre ecuațiile (78.12) sub forma

$$(n_o^{-2} + \zeta'_{11})(x'_1)^2 + (n_o^{-2} + \zeta'_{22})(x'_2)^2 + 2\zeta'_{12}x'_1x'_2 = 1.$$

Indicii de refracție n_1 și n_2 ai undelor liniar polarizate, care se propagă prin cristalul tensionat, se calculează din ecuația pătratică în n^{-2}

$$\begin{vmatrix} \eta_o^{-2} + \zeta'_{11} - n^{-2} & \zeta'_{12} \\ \zeta'_{12} & n_o^{-2}+\zeta'_{22}-n^{-2} \end{vmatrix} = 0. \tag{78.13}$$

Rezolvînd-o obținem

$$n_{1,2}^{-2} = n_o^{-2} + \frac{1}{2}[(\zeta'_{11} + \zeta'_{22}) \pm \sqrt{(\zeta'_{11} - \zeta'_{22})^2 + (2\zeta'_{12})^2}].$$

Ținînd cont că $|\zeta'_{ij}| \ll 1$, pe baza regulilor de calculul aproximațiilor, obținem indicii de refracție

$$n_{1.2} = n_v \left\{1 - \frac{1}{4}n_o^2[(\zeta'_{11} + \zeta'_{22}) \pm \sqrt{(\zeta'_{11} - \zeta'_{22})^2 + (2\zeta'_{12})^2}]\right\}. \tag{78.14}$$

Prin definiție, birefringența, Δ, este egală cu valoarea absolută a diferenței dintre acești indici de refracție, adică

$$\Delta = \frac{1}{2}n_o^3\sqrt{(\zeta'_{11} - \zeta'_{22})^2 + (2\zeta'_{12})^2}. \tag{78.15}$$

Aceasta este tocmai mărimea căutată a birefringenței artificiale pentru cazul în care direcția de propagare a luminii coincide cu axa optică a cristalului netensionat.

Vectorul inducției, $\boldsymbol{D}^{(1)}$, al undei cu indicele de refracție n_1, se află în planul frontului de undă, făcînd unghiul φ cu axa X_1', astfel încît

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{2\zeta_{12}'}{\zeta_{11}' - \zeta_{22}' + \sqrt{(\zeta_{11}' - \zeta_{22}')^2 + (2\zeta_{12}')^2}}. \tag{78.16}$$

Vectorul $\boldsymbol{D}^{(2)}$ se află, de asemenea, în planul frontului de undă și este perpendicular pe vectorul $\boldsymbol{D}^{(1)}$.

Dacă se ia de la bun început sistemul de coordonate special astfel încît $\zeta_{12}' = 0$ (uneori aceasta se reușește plecîndu-se de la considerații de simetrie), atunci birefringența devine

$$\Delta = \frac{1}{2} n_o^3 |\zeta_{11}' - \zeta_{22}'|, \tag{78.17}$$

iar direcțiile de vibrație coincid cu axele X_1' și X_2'.

Dacă direcția de propagare a luminii nu coincide cu axa optică a cristalului liber, birefringența cristalului este compusă din dubla refracție naturală, proprie și cristalului liber, și din cea artificială, determinată de solicitările exterioare. Cînd direcția de propagare a luminii face cu axa optică a cristalului liber un unghi suficient de mare, birefringența artificială reprezintă, de obicei, numai o mică creștere a celei naturale, încît se pot utiliza regulile calculului aproximațiilor. Tocmai acest caz îl vom studia.

Să introducem un sistem de coordonate cartezian special, $X_1'X_2'X_3'$, astfel încît axa X_3' să se suprapună cu direcția de propagare a luminii, iar axele X_1' și X_2' cu direcțiile de vibrație (mai exact, cu direcțiile vectorilor $\boldsymbol{D}$) ale undelor plan polarizate, care se propagă după o direcție dată în cristalul liber. Vom nota indicii de refracție ai acestor unde cu n_{01} și, respectiv, cu n_{02}. Ecuația secțiunii centrale cu planul frontului de undă în sistemul de coordonate special, a indicatricei optice a cristalului liber, are forma

$$\left(\frac{x_1'}{n_{01}}\right)^1 + \left(\frac{x_2'}{n_{02}}\right)^2 = 1, \qquad x_3' = 0. \tag{78.18}$$

Exact la fel cum indicatricea optică servește drept suprafață caracteristică a tensorului tridimensional al impermitivității dielectrice, secțiunea ei centrală cu planul frontului de undă servește drept caracteristică a curbei tensorului bidimensional — a proiecției tensorului inpermitivității dielectrice pe acest plan. Pentru cristalul liber, componentele acestui tensor în sistemul de coordonate special sînt egale cu

$$\left\| \begin{matrix} n_{01}^{-2} & 0 \\ 0 & n_{02}^{-2} \end{matrix} \right\|.$$

în cazul în care cristalul este supus acțiunii unui cîmp electric sau unor tensiuni mecanice, la acest tensor se adaugă tensorul mic, bidimensional

$$\begin{Vmatrix} \zeta'_{11} & \zeta'_{12} \\ \zeta'_{12} & \zeta'_{22} \end{Vmatrix},$$

în care $\zeta'_{\alpha\beta}$ sînt componentele tensorului ζ, examinat în § 77, în sistemul de coordonate special.

În § 20 s-a arătat cum variază valorile proprii și vectorii proprii ai unui tensor simetric de rangul doi în cazul unor variații mici ale componentelor acestuia. Ținînd cont de relația dintre valorile proprii ale unui tensor bidimensional și indicii de refracție, găsim, cu ajutorul relației (20.9) inversele pătratelor indicilor de refracție

$$n_1^{-2} = n_{01}^{-2} + \zeta'_{11}, \qquad n_2^{-2} = n_{02}^{-2} + \zeta'_{22} \tag{78.19}$$

și unghiul mic de rotație a vectorului inducției, $\boldsymbol{D}$, al undelor luminoase

$$\varphi = \omega_{12} = \frac{\zeta'_{12}}{n_{01}^{-2} - n_{02}^{-2}}. \tag{78.20}$$

Valoarea pozitivă a acestui unghi corespunde rotației în jurul axei X'_3 dinspre capătul pozitiv al axei X'_1 spre capătul pozitiv al axei X'_2, iar valoarea negativă — rotației în jurul aceleiași axe, însă în sens invers. Din (78.19), utilizînd regulile calculului aproximațiilor, găsim

$$n_1 = n_{01} - \frac{1}{2} n_{01}^3 \zeta'_{11}, \qquad n_2 = n_{02}^{-2} - \frac{1}{2} n_{02}^3 \zeta'_{22}. \tag{78.21}$$

Prin urmare, birefringența Δ, a unui cristal sub influența solicitărilor exterioare variază cu cantitatea

$$\Delta_{\text{artific}} = \frac{1}{2} \left| n_{01}^3 \zeta'_{11} - n_{02}^3 \zeta'_{22} \right|. \tag{78.22}$$

În această situație, micile variații ale birefringenței trebuie determinate pe fondul birefringenței proprii a cristalului, așa că aceste măsurători sînt mult mai dificile decît în cazul propagării luminii după axa optică.

Cînd folosim formulele (78.14) — (78.17) și (78.20) — (78.22) trebuie să reținem că ele sînt valabile numai în sistemul de coordonate special, care nu coincide, în general, cu sistemul de coor-

donate cristalofizic. Pentru a evita calculele componentelor tensorilor de rangul trei și de rangul patru în sistemul de coordonate special, care sînt foarte laborioase, este indicat ca efectuarea calculelor să se facă după următoarea schemă :

1) se calculează componentele vectorului intensitate a cîmpului electric sau ale tensorului tensiunilor într-un sistem de coordonate cristalofizic ;

2) utilizînd valorile tabelate ale tensorilor coeficienților electrooptici sau piezooptici, se determină, cu ajutorul relațiilor (77.3), (77.17) și (77.22), componentele tensorului ζ în sistemul de coordonate cristalofizic ;

3) se calculează componentele tensorului ζ în sistemul de coordonate special ;

4) înlocuind componentele tensorului ζ în formulele (78.14)—(78.17) sau (78.20) — (78.22), se calculează mărimea birefringenței artificiale și se determină direcțiile de vibrație.

Să examinăm unele particularități ale dublei refracții artificiale în cristalele sistemului cubic și în corpurile izotrope. În acest caz expresia (78.15) determină mărimea birefringenței artificiale pentru orice direcție de propagare a luminii. Tensorul ζ intră în această formulă numai sub formă de combinație a componentelor $\zeta'_{11}-\zeta'_{22}$ și a componentei ζ'_{12}. Rezultă deci că mărimea birefringenței artificiale în corpurile optic izotrope este influențată nu de partea sferică, ci numai de deviatorul tensorului ζ; componentele lui sînt

$$\tilde{\zeta}_{ij} = \zeta_{ij} - \frac{1}{3}\zeta_{kk}\delta_{ij}.$$

Deoarece tensorul ζ este definit prin tensorii coeficienților Kerr, tensorii coeficienților electrooptici și piezooptici, va fi deci necesar să se evalueze măsura în care componentele acestor tensori afectează mărimea birefringenței artificiale și dacă este posibil să se calculeze componentele lor din datele măsurătorilor de birefringență artificială.

Să începem cu studiul coeficienților electrooptici. Dintre corpurile optic izotrope numai cristalele claselor $\bar{4}3m$ și 23 au coeficienții electrooptici diferiți de zero, $r_{41} = r_{52} = r_{63}$; ceilalți coeficienți electrooptici ai acestor cristale sînt egali cu zero. În cazul efectului electrooptic,

$$\tilde{\zeta}_{ij} = \tilde{r}_{ijk} E_k$$

unde

$$\tilde{r}_{ijk} = r_{ijk} - \frac{1}{3} r_{llk}\delta_{ij}, \qquad (78.23)$$

sau, în scriere contrasă,

$$\tilde{r}_{\lambda k} = \begin{cases} r_{\lambda k} - \dfrac{1}{3}(r_{1k} + r_{2k} + r_{3k}) & (\lambda = 1, 2, 3), \\ r_{\lambda k} & (\lambda = 4, 5, 6). \end{cases} \tag{78.24}$$

Dacă înlocuim în (78.24) coeficienţii electrooptici diferiţi de zero, ne convingem că pentru cristalele sistemului cubic $\tilde{r}_{\lambda k} = r_{\lambda k}$ astfel încît măsurînd birefringenţa artificială se poate determina unicul coeficient electrooptic independent al acestor cristale.

Cu totul altfel stau lucrurile în cazul determinării coeficienţilor piezooptici şi coeficienţilor Kerr din măsurători ale birefringenţei artificiale. Să considerăm, pentru precizarea lucrurilor, coeficienţii piezooptici; în acest caz,

$$\tilde{\zeta}_{ij} = \tilde{\pi}_{ijkl}\,\sigma_{kl},$$

unde

$$\tilde{\pi}_{ijkl} = \pi_{ijkl} - \frac{1}{3}\pi_{mmkl}\,\delta_{ij}. \tag{78.25}$$

În scrierea contrasă

$$\tilde{\pi}_{\lambda\mu} = \begin{cases} \pi_{\lambda\mu} - \dfrac{1}{3}(\pi_{1\mu} + \pi_{2\mu} + \pi_{3\mu}) & (\lambda = 1, 2, 3), \\ \pi_{\lambda\mu} & (\lambda = 4, 5, 6). \end{cases} \tag{78.26}$$

Pentru subsistemul inferior al sistemului cubic,

$$\begin{aligned} \tilde{\pi}_{11} &= \frac{1}{3}(\pi_{11} - \pi_{12}) + \frac{1}{3}(\pi_{11} - \pi_{21}), \\ \tilde{\pi}_{12} &= -\frac{2}{3}(\pi_{11} - \pi_{12}) + \frac{1}{3}(\pi_{11} - \pi_{21}), \\ \tilde{\pi}_{21} &= \frac{1}{3}(\pi_{11} - \pi_{12}) - \frac{2}{3}(\pi_{11} - \pi_{21}), \\ \tilde{\pi} &= \pi_{44}. \end{aligned} \tag{78.27}$$

Rezultă deci că oricare ar fi direcţiile în care s-ar măsura birefringenţa artificială, din aceste măsurători se pot determina numai trei combinaţii independente de coeficienţi piezooptici: $\pi_{11} - \pi_{12}$, $\pi_{11} - \pi_{21}$ şi π_{44}; totodată, pentru calculul dublei refracţii artifi-

ciale, determinată de efectul piezooptic, acest set de combinații este complet suficient. Valorile individuale ale coeficienților π_{11}, π_{12} și π_{21} sînt necesare pentru calculul variațiilor absolute ale indicilor de refracție și se pot calcula din rezultatele măsurătorilor respective. Aceste măsurători sînt însă mult mai dificile decît măsurătorile de birefringență, deoarece pentru ele sînt deja necesare nu metodele de polarizare, ci metodele interferențiale.

Pentru cristalele subsistemului superior al sistemului cubic, $\pi_{21} = \pi_{12}$. Înlocuind această egalitate în formulele (78.27), găsim

$$\tilde{\pi}_{11} = \frac{2}{3}(\pi_{11} - \pi_{12}),$$

$$\tilde{\pi}_{12} = -\frac{1}{3}(\pi_{11} - \pi_{12}), \tag{78.28}$$

$$\tilde{\pi}_{44} = \pi_{44}.$$

Prin urmare, în acest caz, măsurătorile birefringenței artificiale permit determinarea numai a diferenței $\pi_{11} - \pi_{12}$ precum și a coeficientului π_{44}.

În fine, pentru corpurile izotrope, $\pi_{44} = \pi_{11} - \pi_{12}$, această diferență definind complet birefringența artificială, determinată de efectul piezooptic în corpurile izotrope.

Efectul piezooptic în corpurile izotrope transparente se utilizează pe larg pentru ca, plecînd de la figura de interferență, care apare datorită dublei refracții artificiale, provocată de cîmpul neomogen de tensiuni, să se reconstituie cîmpul tensiunilor care i-a dat naștere. Aceste aplicații se pot cunoaște apelînd, de exemplu, la cărțile: Koker și Failon (1939); Diurelli și Raili (1970); Föppl și Menx (1966).

Asupra efectului electrooptic și aplicațiilor sale se pot consulta lucrările Jeludev (1968, 1969); Mustel și Parîghin (1970); Sonin și Vasilevskaia (1971).

§ 79. POLARIZAREA NELINIARĂ ÎN CAZUL PROPAGĂRII UNOR UNDE ELECTROMAGNETICE DE INTENSITATE MARE

Polarizarea unui dielectric anizotrop în cîmpuri armonice intense este constituită din partea liniară, $\boldsymbol{P}^{(1)}$, și din corecțiile pătratice, $\boldsymbol{P}^{(2)}$, și cubice, $\boldsymbol{P}^{(3)}$, etc.

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}^{(1)} + \boldsymbol{P}^{(2)} + \boldsymbol{P}^{(3)} + \ldots \tag{79.1}$$

Ținînd cont că polarizabilitatea depinde de frecvență, vom indica frecvențele componentelor armonice ale cîmpului electric și ale polarizării. Formal se poate scrie

$$P_i^{(1)}(\omega_1) = \alpha_{ij}(\omega_1, \omega_2)\, E_j(\omega_2),$$

$$P_i^{(2)}(\omega_1) = \chi_{ijk}(\omega_1, \omega_2, \omega_3)\, E_j(\omega_2)\, E_k(\omega_3), \tag{79.2}$$

$$P_i^{(3)}(\omega_1) = \theta_{ijkl}(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4)\, E_j(\omega_2)\, E_k(\omega_3)\, E_l(\omega_4).$$

Tensorii α, χ, θ se numesc, respectiv, tensorul susceptibilității liniare, tensorul susceptibilității pătratice și tensorul susceptibilității cubice. Tensorul $\alpha(\omega_1, \omega_2)$ dă mărimea și direcția părții liniare a polarizării avînd frecvența ω_1, care ia naștere sub acțiunea unui cîmp electric de frecvență ω_2; tensorul $\chi(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ exprimă corecția pătratică a polarizării avînd frecvența ω_1, determinată de interacțiunea în cristal a două cîmpuri electrice armonice, unul de frecvență ω_2 și celălalt de frecvență ω_3.

Vom prezenta, fără demonstrație, o importantă proprietate a tensorilor susceptibilității (demonstrația se poate găsi, de pildă, în cărțile de la sfîrșitul § 80). În general, acești tensori nu au nici un fel de simetrie internă și totuși componentele tensorilor nu se modifică dacă concomitent cu permutarea indicilor se face și permutarea corespunzătoare a frecvențelor

$$\alpha_{ij}(\omega_1, \omega_2) = \alpha_{ji}(\omega_2\, \omega_1),$$

$$\chi_{ijk}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) = \chi_{ijk}(\omega_1, \omega_3, \omega_2) = \chi_{jik}(\omega_2, \omega_1, \omega_3) = \ldots, \tag{79.3}$$

$$\theta_{ijkl}(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4) = \theta_{jikl}(\omega_2, \omega_1, \omega_3, \omega_4) =$$

$$= \theta_{kjil}(\omega_3, \omega_2, \omega_1, \omega_4) = \ldots .$$

Relațiile ce se obțin prin permutări ce nu afectează primul indice și prima frecvență corespunzătoare sînt banale: este evident că cîmpurile $E_j(\omega_2)$, $E_k(\omega_3)$, $E_l(\omega_4)$ pot fi introduse în formula (79.2) în orice ordine. Au sens fizic și necesită demonstrație numai formulele care se obțin prin permutări în care iau parte primul indice și prima frecvență, de exemplu,

$$\chi_{ijk}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) = \chi_{ijk}(\omega_2, \omega_1, \omega_3).$$

Dacă toate frecvențele sînt diferite, aceste relații leagă componentele diverșilor tensori și de aceea nu reprezintă o confirmare a

existenţei unei simetrii interne. Ei definesc simetria internă a tensorilor numai în cazul coincidenţei frecvenţelor. De pildă, relaţia

$$\chi_{ijk} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3) = \chi_{ikj}(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$$

leagă între ele componentele aceluiaşi tensor şi arată că el este simetric în raport cu ultimii doi indici, adică are simetria internă $V[V^2]$.

Pentru a formula cît mai clar relaţiile (79.3) am scris frecvenţele $\omega_1, \ldots, \omega_4$ formal, fără să ne punem problema în ce măsură ele sînt independente. În realitate, frecvenţa de polarizare este legată de frecvenţele cîmpului. Dacă polarizarea depinde liniar de intensitatea cîmpului, atunci, evident, frecvenţele lor coincid. Rezultă deci că tensorul susceptibilităţii liniare, $\alpha(\omega_1, \omega_2)$, este diferit de zero numai pentru $\omega_1 = \omega_2$, astfel încît el poate fi scris sub forma $\alpha(\omega)$; este clar că el este simetric.

Să deducem relaţiile de frecvenţe pentru tensorul susceptibilităţii pătratice, $\chi(\omega_1, \omega_2. \omega_3)$. În orice punct fixat al cristalului, cîmpurile $\boldsymbol{E}(\omega_2)$ şi $\boldsymbol{E}(\omega_3)$ depind de timp după legea

$$E_j(\omega_2) = A_j \cos \omega_2 t,$$

$$E_k(\omega_3) = B_k \cos (\omega_3 t + \varphi),$$

în care φ este diferenţa de fază dintre aceste cîmpuri în punctul considerat. Deoarece

$$E_j(\omega_2)\, E_k(\omega_3) = \frac{1}{2} A_j\, B_k\{\cos[(\omega_2 - \omega_3)t - \varphi] + \cos[(\omega_1 + \omega_2)t + \varphi]\},$$

rezultă că polarizarea, care depinde pătratic de cîmp, are fie frecvenţa diferenţă $(\omega_2 - \omega_3)$, fie frecvenţa sumă $(\omega_2 + \omega_3)$. Cu alte cuvinte, tensorul $\chi(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ este diferit de zero numai în două cazuri

$$\chi = \chi(\omega_2 - \omega_3, \omega_2, \omega_3),$$

$$\chi = \chi(\omega_2 + \omega_3, \omega_2, \omega_3). \tag{79.4}$$

Dacă prin cristal se trimite numai o radiaţie monocromatică de frecvenţă ω, suficient de intensă pentru ca în afară de polarizarea liniară să apară şi polarizarea pătratică, atunci $\omega_2 = \omega_3 = \omega$, iar expresia (79.4) se transformă în

$$\chi = \chi(0, \omega, \omega),$$

$$\chi = \chi(2\omega, \omega, \omega). \tag{79.5}$$

Aşadar, efectele pătratice duc, în acest caz, la apariţia unei componente constante şi a unei armonice de ordinul doi.

Acelaşi tensor, $\chi(0, \omega, \omega)$, care defineşte componenta constantă în cazul polarizării pătratice, caracterizează şi efectul electrooptic. Într-adevăr, dacă se ţine cont de polarizarea pătratică, vectorul inducţie al undei luminoase de frecvenţă ω într-un cristal care se află în cîmpul electrostatic $\boldsymbol{E}(0)$ este egal cu

$$D_i(\omega) = E_i(\omega) + 4\pi P_i(\omega) = E_i(\omega) + 4\pi P_i^{(1)}(\omega) + 4\pi P_i^{(2)}(\omega).$$

Notînd

$$\varkappa_{ij}(\omega) = \delta_{ij} + 4\pi\alpha_{ij}(\omega),$$

se poate scrie

$$D_i(\omega) = \varkappa_{ij}(\omega)E_j(\omega) + 4\pi\chi_{kij}(0, \omega, \omega)\, E_k(0)\, E_j(\omega).$$

Tensorii permitivităţii dielectrice, $\boldsymbol{\varkappa}(\omega)$, şi al impermitivităţii dielectrice, $\boldsymbol{\eta}(\omega)$, sînt reciproc inverşi, atît în absenţa cîmpului electric, $E(0)$, cît şi în prezenţa lui

$$\varkappa_{ij}(\omega)\, \eta_{jm}(\omega) = \delta_{im},$$

$$[\varkappa_{ij}(\omega) + 4\pi\chi_{kij}(0, \omega, \omega)E_k(0)][\eta_{jm}(\omega) + r_{jmk}(\omega)E_k(0)] = \delta_{im}.$$

Cu o precizie de pînă la infiniţi mici de ordinul doi, aceasta dă

$$\varkappa_{ij}(\omega)r_{jmk}(\omega)E_k(0) + 4\pi\chi_{kij}(0, \omega, \omega)E_k(0)\eta_{jm}(\omega) = 0,$$

de unde se pot obţine fără nici o dificultate formulele care leagă tensorii efectului electrooptic de tensorul susceptibilităţii pătratice

$$r_{lmk}(\omega) = -4\pi\chi_{kij}(0, \omega, \omega)\, \eta_{il}(\omega)\eta_{jm}(\omega) = 0,$$
$$\chi_{kij}(0, \omega, \omega) = -\frac{1}{4\pi}\varkappa_{il}(\omega)\, \varkappa_{jm}(\omega)\, r_{lmk}(\omega). \tag{79.6}$$

Relaţiile dintre frecvenţe, pentru susceptibilitatea dielectrică cubică duc la faptul că tensorul $\boldsymbol{\theta}(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4)$ este diferit de zero numai pentru frecvenţele

$$\omega_1 = \omega_2 + \omega_3 - \omega_4, \quad \omega_1 = \omega_2 - \omega_3 + \omega_4$$
$$\omega_1 = -\omega_2 + \omega_3 + \omega_4, \quad \omega_1 = \omega_2 + \omega_3 + \omega_4. \tag{79.7}$$

În particular, tensorul $\theta(3\omega, \omega, \omega, \omega)$ descrie generarea armonicei de ordinul trei, tensorul $\theta(0, 0, \omega, \omega)$ efectul Kerr, tensorul $\theta(2\omega, 0, \omega, \omega)$, generarea armonicei de ordinul doi pe seama polarizării cubice cu ajutorul unui cîmp electrostatic suficient de intens.

Polarizarea pătratică se exprimă prin tensorii de rangul trei. Prin urmare, ea este osibilă numai în cristalele care au centru de simetrie. În particular, generarea armonicei de ordinul doi şi efectul electrooptic sînt descrise de tensori cu simetria internă $V[V^2]$, a căror formă generală coincide, evident, cu forma tensorilor coeficienţilor piezoelectrici. Valorile lor pentru unele cristale sînt date în tabelul 79.1.

Tabelul 79.1

Coeficienţii susceptibilităţii pătratice, $\chi_{k\mu}$ (2ω, ω, ω) ai unor cristale, în 10^{-8} unit. CGSel; lungimea de undă, λ, corespunde frecvenţei

Cristalul	Clasa	λ, nm	Indicii kμ					
			14	15	22	31	33	36
GaAs	$\bar{4}3m$	694	294					
		1 060	348					
InSb	$\bar{4}3m$	694	204					
		1 060	460					
GaP	$\bar{4}3m$	1 060	780					
ZnS	$\bar{4}3m$	10 600	7,3					
ZnS	$6mm$	10 600		10,5		4,5	8,9	
$LiNbO_3$	$3m$	1 060			3,8	6,1	49,8	
$LiTaO_3$	$3m$	1 060			2,5	1,6	24	
KDP	$\bar{4}2m$	694	0,59					0,62
ADP	$\bar{4}2m$	694						0,56

Efectele de polarizare cubică se caracterizează, dimpotrivă, prin tensori de rangul patru şi, prin urmare, sînt posibile în mediile cu orice simetrie. În particular, generarea unei armonice de ordinul trei este descrisă de un tensor cu simetria internă $V[V^3]$, efectul Kerr, de un tensor de simetrie internă $[V^2]^2$, iar generarea armonicei de ordinul doi cu ajutorul cîmpului electrostatic, de către tensorul $V^2[V^2]$. Forma generală a acestor tensori, pentru toate subsistemele, este dată în tabelele E.16, E.17, E.19, E.21 şi E.22.

§ 80. GENERAREA ARMONICELOR LUMINOASE. DIRECŢIILE DE SINCRONISM

Cînd printr-un cristal transparent, care are tensorul coeficienţilor susceptibilităţii dielectrice pătratice diferit de zero, se

propagă o undă luminoasă monocromatică, cu intensitățile cîmpului electric $\boldsymbol{E}(\omega_2)$ și $\boldsymbol{E}(\omega_3)$, în cristal apare polarizarea electrică pătratică avînd frecvența egală cu suma frecvențelor celor două cîmpuri electrice

$$\boldsymbol{P}^{(2)}(\omega_2 + \omega_3) = \chi(\omega_2 + \omega_3, \omega_2, \omega_3) : \boldsymbol{E}(\omega_2)\ \boldsymbol{E}(\omega_3). \tag{80.1}$$

Această polarizare poate servi ca sursă de unde luminoase cu frecvența sumă. Generarea efectivă a unei asemenea unde precum și direcția ei de propagare depind de condițiile de interferență: polarizarea pătratică ce ia naștere într-un punct dat al cristalului trebuie să amplifice unda de frecvență sumă, care trece prin acest punct. Condițiile ca interferența să fie constructivă se obțin cel mai simplu interpretînd generarea undei de frecvență sumă ca pe o reacție între fotoni

$$\Phi(\omega_2, \boldsymbol{k}_2, \boldsymbol{d}_2) + \Phi(\omega_3, \boldsymbol{k}_3, \boldsymbol{d}_3) = \Phi(\omega_1, \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{d}_1); \tag{80.2}$$

aici $\boldsymbol{k}$ este vectorul de undă al fotonului respectiv, iar $\boldsymbol{d}$ vectorul unitar al direcției de vibrație. În cadrul reacției trebuie să se conserve energia

$$\hbar\omega_2 = \hbar\omega_3 = \hbar\omega_1 \tag{80.3}$$

și impulsul

$$\hbar\boldsymbol{k}_2 + \hbar\boldsymbol{k}_3 = \hbar\boldsymbol{k}_1. \tag{80.4}$$

Legea de conservare a energiei confirmă faptul că unda rezultantă are frecvența sumă. Din legea de conservare a impulsului rezultă însă că și vectorul său de undă este suma vectorilor de undă a celor două cîmpuri electrice

$$\boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{k}_2 + \boldsymbol{k}_3. \tag{80.5}$$

Deoarece

$$\boldsymbol{k} = \frac{\omega n(\omega, \boldsymbol{d})}{c}\boldsymbol{m},$$

unde $\boldsymbol{m}$ este vectorul unitar al normalei undei, $n = n(\omega, \boldsymbol{d})$ este indicele de refracție, iar c viteza luminii în vid. Expresia (80.5) poate fi transcrisă sub forma

$$(\omega_2 + \omega_3)n(\omega_2 + \omega_3, \boldsymbol{d}_1)\boldsymbol{m}_1 = \omega_2 n(\omega_2, \boldsymbol{d}_2)\boldsymbol{m}_2 + \omega_3 n(\omega_3, \boldsymbol{d}_3)\boldsymbol{m}_3. \tag{80.6}$$

Aceasta este tocmai condiția ca interferența să fie constructivă, necesară pentru generarea undei de frecvență sumă și de intensitate mare.

Condiția de generare a armonicei de ordinul doi este un caz particular al relației (80.6), cînd $\omega_2 = \omega_3 = \omega$

$$n(2\omega, \boldsymbol{d}_1)\,\boldsymbol{m}_1 = \frac{1}{2}\left[n(\omega, \boldsymbol{d}_2)\,\boldsymbol{m}_2 + n(\omega, \boldsymbol{d}_3)\boldsymbol{m}_3\right]. \qquad (80.7)$$

Dacă pentru undele cu frecvența fundamentală coincid și direcțiile de vibrație ($\boldsymbol{d}_2 = \boldsymbol{d}_3 = \boldsymbol{d}$), această condiție se simplifică și mai mult

$$n(2\omega, \boldsymbol{d}_1)\,\boldsymbol{m}_1 = n(\omega, \boldsymbol{d})\,\frac{\boldsymbol{m}_2 + \boldsymbol{m}_3}{2}; \qquad (80.8)$$

vectorul de undă al armonicei de ordinul doi se află, în acest caz, exact la mijloc, între vectorii de undă ai undelor cu frecvența fundamentală.

În fine, condiția ca armonica de ordinul doi să fie generată de o undă cu frecvența fundamentală se obține de aici, pentru $\boldsymbol{m}_2 = \boldsymbol{m}_3 = \boldsymbol{m}$

$$n(2\omega, \boldsymbol{d}_1)\boldsymbol{m}_1 = n(\omega, \boldsymbol{d})\boldsymbol{m}. \qquad (80.9)$$

Evident, în acest caz, $\boldsymbol{m}_1 = \boldsymbol{m}$, adică direcția de propagare a undei armonicei de ordinul doi coincide cu direcția de propagare a undei avînd frecvența fundamentală.

Condițiile de interferență constructivă, (80.7), (80.8) și (80.9), necesare pentru generarea undei armonice de ordinul doi suficient de intense, sînt satisfăcute numai de un număr restrîns de direcții; ele se numesc *direcții de sincronism*. În corpurile optic izotrope, de pildă, de cele mai multe ori asemenea direcții nu există deloc. Într-adevăr, pentru corpurile optic izotrope condițiile (80.7) și (80.8) se reduc la

$$n(2\omega)\boldsymbol{m}_1 = n(\omega)\frac{\boldsymbol{m}_2 + \boldsymbol{m}_3}{2}. \qquad (80.10)$$

Pentru ca condiția (80.10) să fie satisfăcută este necesar ca $n(2\omega) \leqslant n(\omega)$; deoarece însă în cazul unei dispersii normale indicele de refracție crește cu frecvența, rezultă că această condiție s-ar putea realiza numai în cazul în care în intervalul dintre frecvențele ω și 2ω în mediul optic neliniar și izotrop dat există un inter-

val de dispersie anomală, adică între aceste frecvenţe să existe o linie de absorbţie. Din condiţia (80.9) rezultă pentru un corp optic izotrop relaţia

$$n(2\omega) = n(\omega),$$

care chiar şi în cazul existenţei între frecvenţele ω şi 2ω a unei benzi de absorbţie, pentru o frecvenţă ω, dată, se poate realiza numai din întîmplare.

În cristalele optic anizotrope direcţiile de sincronism pot exista şi în absenţa liniilor de absorbţie dintre frecvenţele ω şi 2ω. Să examinăm, de exemplu, cum se pot determina direcţiile de sincronism pentru generarea unei armonice de ordinul doi de către unda de frecvenţă fundamentală, în cristalele uniaxe. În acest caz trebuie satisfăcută relaţia

$$n(2\omega, \boldsymbol{d}_1) = n(\omega, \boldsymbol{d}). \qquad (80.11)$$

Vom căuta direcţiile de sincronism cu ajutorul suprafeţelor indicilor de refracţie. Datorită dispersiei, diferitelor frecvenţe le vor corespunde suprafeţe ale indicilor de refracţie diferite; în cazul unei dispersii normale, suprafaţa care corespunde frecvenţei mai mari are dimensiuni mai mari.

Dacă pe o axă comună şi cu un centru comun se desenează suprafeţele indicilor de refracţie pentru frecvenţele ω şi 2ω (secţiunile acestor suprafeţe se pot vedea în figura 80.1), atunci dreptele care unesc centrul cu cercul după care se intersectează aceste

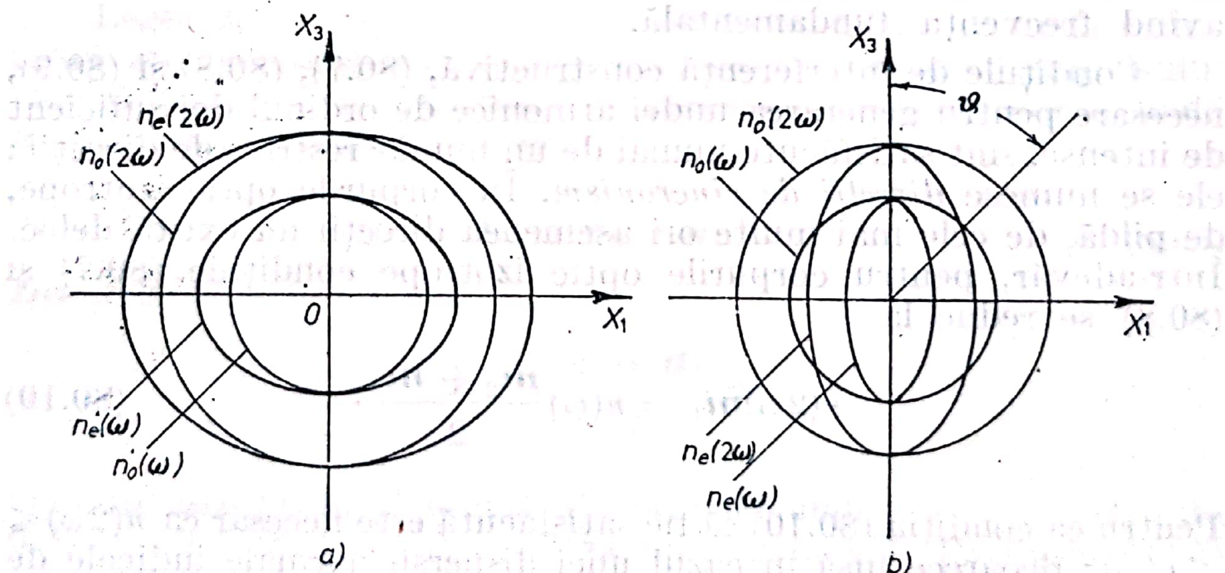


Fig. 80.1. Secţiuni ale suprafeţei indicilor de refracţie ai unor cristale uniaxe: *a)* cristal optic pozitiv, nu are direcţii de sincronism; *b)* cristal optic negativ, are direcţii de sincronism ce fac unghiul θ cu axa optică.

suprafețe sînt direcțiile de sincronism. Direcțiile de sincronism fac un con a cărui axă este paralelă cu axa optică a cristalului. În cazul unei anizotropii optice mici (sau al unei dispersii prea intense) aceste suprafețe nu se intersectează; înseamnă că în cristal nu există direcții de sincronism pentru dublarea acestei frecvențe.

Din figura 80.1 reiese clar că direcțiile de sincronism pentru cristalele optic pozitive și pentru cele optic negative se determină respectiv din condițiile (în continuare, în acest paragraf, formulele analoage, dar care nu coincid, vor fi notate cu + și cu − la numărul formulelor pentru cristalele optic pozitive ($N_e > N_o$) și, respectiv, pentru cristalele optic negative ($N_e < N_o$)

$$n_e(\omega) = n_o(2\omega), \tag{80.12$^+$}$$

$$n_o(\omega) = n_e(2\omega); \tag{80.12$^-$}$$

în ambele cazuri cele două unde, care satisfac condiția de sincronism sînt polarizate în direcții reciproc perpendiculare. În cristalele optic uniaxe, indicele de refracție al undei ordinare, n_0, nu depinde de direcția de propagare: $n_o = N_o$, iar indicele de refracție al undei extraordinare, n_e, depinde de unghiul θ dintre direcțiile de propagare a undei și axa optică

$$n_e^{-2} = N_e^{-2} \sin^2 \theta + N_o^{-2} \cos^2 \theta;$$

aici, N_o și N_e sînt indicii de refracție principali (v. § 35). Înlocuind aceste valori în condiția (80.12), găsim, după calcule simple, unghiul θ dintre direcția de sincronism și axa optică a cristalului

$$\sin \theta = \sqrt{\frac{N_o^{-2}(\omega) - N_o^{-2}(2\omega)}{N_o^{-2}(\omega) - N_e^{-2}(\omega)}}, \tag{80.13$^+$}$$

$$\sin \theta = \sqrt{\frac{N_o^{-2}(\omega) - N_o^{-2}(2\omega)}{N_e^{-2}(2\omega) - N_o^{-2}(2\omega)}}. \tag{80.13$^-$}$$

Dacă mărimea sin θ, calculată după formula corespunzătoare din (80.13), nu depășește unitatea în valoare absolută, cum și trebuie, atunci cristalul respectiv are un con întreg de direcții de sincronism: condiția de sincronism este satisfăcută de unda extraordinară, sau, respectiv, ordinară, de frecvență ω, care se propagă în acest cristal în direcția

$$\boldsymbol{m} = (\boldsymbol{e}_1 \cos \varphi + \boldsymbol{e}_2 \sin \varphi) \sin \theta + \boldsymbol{e}_3 \cos \theta, \tag{80.14}$$

în care e_1, e_2, e_3 sînt versorii sistemului de coordonate cristalofizic, unghiul φ este arbitrar, iar unghiul θ se determină cu ajutorul formulelor (80.13). Însă această undă trebuie să genereze și polarizarea pătratică, și anume într-o direcție astfel încît unda de frecvență dublă să fie polarizată perpendicular pe unda inițială.

Direcția vectorului intensitate a cîmpului electric, $\boldsymbol{E}$, din unda ordinară coincide cu direcția vectorului inducție electrică, $\boldsymbol{D}$. Vectorul unitar al acestei direcții pentru unda a cărei normală este determinată de formula (80.14), este egal cu

$$\boldsymbol{e}_0 = \boldsymbol{d}_0 = \boldsymbol{e}_1 \sin\varphi - \boldsymbol{e}_2 \cos\varphi. \qquad (80.15)$$

În unda extraordinară, vectorii unitari ai inducției electrice, $\boldsymbol{d}_e$, și intensității cîmpului electric, $\boldsymbol{e}_e$, sînt diferiți și egali respectiv cu

$$\boldsymbol{d}_e = (\boldsymbol{e}_1 \cos\varphi + \boldsymbol{e}_2 \sin\varphi)\cos\theta - \boldsymbol{e}_3 \sin\theta, \qquad (80.16)$$

$$\boldsymbol{e}_e = A[N_o^{-2}(\boldsymbol{e}_1 \cos\varphi + \boldsymbol{e}_2 \sin\varphi)\cos\theta - N_e^{-2}\boldsymbol{e}_3 \sin\theta], \qquad (80.17)$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{N_o^{-4}\cos^2\theta + N_e^{-4}\sin^2\theta}}. \qquad (80.18)$$

Unda de frecvență dublă este generată de componenta $\boldsymbol{e}(2\omega)\cdot\boldsymbol{P}(2\omega)$ a vectorului polarizare pătratică, $\boldsymbol{P}(2\omega)$, în direcția vectorului intensitate a cîmpului electric în unda armonicei de ordinul doi, $\boldsymbol{e}(2\omega)$; această componentă este egală cu frecvența fundamentală, $E^2 = E^2(\omega)$, înmulțită respectiv cu una dintre contracțiile tensorului susceptibilității pătratice,

$$\chi = \chi(2\omega, \omega, \omega)$$

avînd vectorii unitari $\boldsymbol{e}_o$ și $\boldsymbol{e}_e$ dați de relațiile

$$\begin{aligned}\boldsymbol{e}_o\cdot\chi:\boldsymbol{e}_e\boldsymbol{e}_e = A^2\{&N_o^{-4}\cos^2\theta\,[\chi_{12}\sin^3\varphi - (\chi_{22}-\chi_{16})\sin^2\varphi\cos\varphi + \\ &+ (\chi_{11}-\chi_{26})\sin\varphi\cos^2\varphi - \chi_{21}\cos^3\varphi] - \\ &- N_o^{-2}N_e^{-2}\sin\vartheta\cos\vartheta[\chi_{14}\sin^2\varphi + (\chi_{15}-\chi_{24})\sin\varphi\cos\varphi - \chi_{25}\cos^2\varphi] + \\ &+ N_e^4\sin^2\vartheta[\chi_{13}\sin\varphi - \chi_{23}\cos\varphi]\},\end{aligned} \qquad (80.19^+)$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{e}_e\cdot\chi:\boldsymbol{e}_o\boldsymbol{e}_o = A\{&N_o^{-2}\cos\vartheta[\chi_{21}\sin^3\varphi + (\chi_{11}-\chi_{26})\sin^2\varphi\cos\varphi + \\ &+ (\chi_{22}-\chi_{16})\sin\varphi\cos^2\varphi + \chi_{12}\cos^3\varphi] - \\ &- N_e^{-2}\sin\vartheta[\chi_{31}\sin^2\varphi - \chi_{36}\sin\varphi\cos\varphi + \chi_{32}\cos^2\varphi]\}.\end{aligned} \qquad (80.19^-)$$

Aceste contracții pot fi considerate drept componentele χ'_{122} și χ'_{211} ale tensorului χ în sistemul de coordonate special, $X'_1X'_2X'_3$, ale cărui axe $X'_1 \| \boldsymbol{e}_0$ și și $X'_2 \| \boldsymbol{e}_e$. Coeficienții susceptibilității pătra-

tice, $\chi_{i\mu}$, din formulele (80.19) se determină folosind regulile de recalculare (trecere la noile notații) (ele sînt la fel cu cele pentru coeficienții piezoelectrici, $d_{i\mu}$; aceleași reguli de recalculare pentru coeficienții $\chi_{i\mu}$ utilizează Ahmanov și Hohlov (1964) și Blombergen (1966))

$$\chi_{i\mu} = \begin{cases} \chi_{ikl} & (kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2\chi_{ikl} & (kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \end{cases} \tag{80.20}$$

care corespund regulilor general acceptate pentru diadele $(\boldsymbol{EE})_\mu$

$$(\boldsymbol{EE})_\mu = E_k E_l \ (kl \leftrightarrow \mu = 1, \ldots, 6).$$

Să substituim în formulele (80.19) valorile coeficienților $\chi_{i\mu}$ și să trecem rezultatele în tabelul 80.1.

Din tabelul 80.1 se vede că cristalele negative din clasele 422, 622, $\infty 2$ precum și cristalele pozitive din clasele $4mm$, $6mm$ și ∞m în general nu se pot folosi pentru generarea armonicei de ordinul doi. În realitate sînt mult mai multe clase practic nepotrivite pentru generarea armonicei de ordinul doi. Este vorba despre faptul că tensorul $\chi(2\omega, \omega, \omega)$ devine nesimetric în raport cu indicii numai datorită dispersiei. Dacă în întreg intervalul de frecvențe $(\omega - 2\omega)$ cristalul este transparent, atunci dispersia în acest interval de frecvențe este mică, astfel încît tensorul $\chi(2\omega, \omega, \omega)$ este apropiat de tensorul simetric $\tilde{\chi}_{ikl} = \chi_{(ikl)}$. Calculînd contracțiile cuprinse în tabelul 80.1 pentru tensorul simetrizat, găsim că și cristalele pozitive din clasele 4, 6, ∞, 422, 622, $\infty 2$ nu sînt utilizabile practic pentru generarea unei armonice de ordinul doi.

Cele mai adecvate pentru generarea unei armonice de ordinul doi sînt acele direcții de sincronism care duc la o valoare maximă a expresiei tabelate corespunzătoare. De exemplu, în cazul cristalelor optic uniaxe, negative, de dihidrofosfat de potasiu (KDP) și de dihidrofosfat de amoniu (ADP) — clasa $\bar{4}2m$ — utilizate pentru dublarea frecvenței unei radiații laser, maximul expresiei tabelate se atinge pentru $\varphi = 45°$. După cum se vede din formula (80.14), aceasta corespunde direcției normalei de undă

$$\boldsymbol{m} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2) \sin \theta + \boldsymbol{e}_3 \cos \theta.$$

Cristalele biaxe, lipsite de centru de simetrie, sînt, de asemenea potrivite pentru generarea armonicei de ordinul doi; din punctul de vedere al fizicii cristalelor ele sînt chiar de preferat

cristalelor uniaxe, deoarece prezintă o gamă mai variată de direcții disponibile. Însă analiza posibilităților care apar în acest caz este mult mai complicată și probabil este mai convenabil să nu se facă în forma generală care conduce la formule prea complicate, ci pentru fiecare cristal în parte (v. Orlov, 1969).

Din punct de vedere cristalofizic, generarea armonicei de ordinul trei se studiază în mod analog. Deoarece tensorul θ, care

Tabelul 80.1

Componenta vectorului polarizare pătratică după direcția intensității cîmpului electric din unda armonicei de ordinul doi

Clasele	Funcția $F = F(\chi, N, \theta, \varphi)$	
	Cristale pozitive: $e(2\omega)\cdot P(2\omega) = A^2F$, $N = N(\omega)$	Cristale negative: $e(2\omega)\cdot P(2\omega) = AF$, $N = N(2\omega)$
3	$N_o^{-4}\cos^2\theta\,(\chi_{11}\sin 3\varphi + \chi_{22}\cos 3\varphi) - \frac{1}{2}N_o^{-2}N_e^{-2}\chi_{14}\sin 2\theta$	$N_o^{-2}\cos\theta\,(\chi_{22}\sin 3\varphi - \chi_{11}\cos 3\varphi) - N_e^{-2}\chi_{31}\sin\theta$
32	$N_o^{-4}\chi_{11}\cos^2\theta\sin 3\varphi - \frac{1}{2}N_o^{-2}N_e^{-2}\chi_{14}\sin 2\theta$	$N_o^{-2}\chi_{11}\cos\theta\cos 3\varphi$
$3m$	$N_o^{-4}\chi_{22}\cos^2\theta\cos 3\varphi$	$N_o^{-2}\chi_{22}\cos\theta\sin 3\varphi - N_e^{-2}\chi_{31}\sin\theta$
4, 6, ∞	$-\frac{1}{2}N_o^{-2}N_e^{-2}\chi_{14}\sin 2\theta$	$-N_e^{-2}\chi_{31}\sin\theta$
422, 622, ∞2	$-\frac{1}{2}N_o^{-2}N_e^{-2}\chi_{14}\sin 2\theta$	0
$4mm$, $6mm$, ∞m	0	$-N_e^{-2}\chi_{31}\sin\theta$
$\bar{4}$	$\frac{1}{2}N_o^{-2}N_e^{-2}\sin 2\theta \times (\chi_{14}\cos 2\varphi + \chi_{24}\sin 2\varphi)$	$N_e^{-2}\sin\theta\left(\chi_{31}\cos 2\varphi + \frac{1}{2}\chi_{36}\sin 2\varphi\right)$
$\bar{4}2m$	$\frac{1}{2}N_o^{-2}N_e^{-2}\chi_{14}\sin 2\theta\cos 2\varphi$	$\frac{1}{2}N_e^{-2}\chi_{36}\sin\theta\sin 2\varphi$
$\bar{6}$	$N_o^{-4}\cos^2\theta\,(\chi_{11}\sin 3\varphi + \chi_{22}\cos 3\varphi)$	$N_o^{-2}\cos\theta\,(\chi_{22}\sin 3\varphi - \chi_{11}\cos 3\varphi)$
$\bar{6}m2$	$N_o^{-4}\chi_{22}\cos^2\theta\cos 3\varphi$	$N_o^{-2}\chi_{22}\cos\theta\sin 3\varphi$

definește armonica, este de tip par, pentru generarea unei armonice de ordinul trei pot fi utilizate și cristale din clasele cu centru de simetrie, astfel încît simetria acestui efect să fie afectată numai de subsistem nu și de clasa cristalului.

În ultimele două paragrafe a fost analizat numai aspectul cristalofizic al unora dintre cele mai simple probleme din optica neliniară a cristalelor. Asupra opticii neliniare, în general, se pot consulta lucrările lui Ahmanov și Hohlov (1964); Ahmanov (1969); Blombergen (1966); Klimontovici (1966); Pekara (1973); Schubert și Wilhelmi (1973).

§ 81. ACTIVITATEA OPTICĂ A CRISTALELOR

În toate mediile condensate, inclusiv în cristale, se produce *dispersia spațială*: vectorul polarizării electrice, $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}, t)$ este determinat nu numai de valoarea vectorului intensitate a cîmpului electric, $\boldsymbol{E}$, într-un singur punct, $\boldsymbol{r}$, ci și de valorile lui din vecinătatea acestui punct. Dacă cîmpul electric ar fi omogen, atunci valorile lui în vecinătatea punctului $\boldsymbol{r}$ ar fi aceleași ca și în însuși punctul $\boldsymbol{r}$, astfel încît dispersia spațială nu s-ar manifesta în nici un fel. Din această cauză, dispersia spațială poate fi tratată drept dependența vectorului polarizare electrică, $\boldsymbol{P}$, nu numai de vectorul $\boldsymbol{E}$, ci și de derivatele lui în raport cu spațiul. Mărginindu-ne la primii termeni ai dezvoltării, obținem

$$P_i = \alpha_{ij} E_j + \beta_{ijk} \frac{\partial E_j}{\partial x_k}, \quad \boldsymbol{P} = \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{E} + \boldsymbol{\beta} : \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial \boldsymbol{r}}. \tag{81.1}$$

În cristalele la care tensorul $\boldsymbol{\beta}$ este diferit de zero, apare dispersia spațială de ordinul întîi; aceste cristale se numesc cristale *optic active*. În toate celelalte este posibilă numai dispersia spațială de ordinul doi: în acestea, polarizarea depinde numai de derivatele spațiale de ordinul doi, nu și de primele derivate. Ne vom limita la studiul activității optice (despre influența dispersiei spațiale de ordinul doi asupra proprietăților optice ale cristalelor se găsesc amănunte în Agranovici și Ghinzburg, 1965).

În cadrul opticii cristalelor este mai comod să se studieze intensitatea cîmpului electric, $\boldsymbol{E}$, în funcție de inducția electrică $\boldsymbol{D}$; atunci, în loc de (81.1) vom scrie

$$E_i = \eta_{ij} D_j + \gamma_{ijk} \frac{\partial D_j}{\partial x_k}, \quad \boldsymbol{E} = \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{D} + \boldsymbol{\gamma} : \frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial \boldsymbol{r}}. \tag{81.2}$$

Deoarece pentru o undă monocromatică cu vectorul de undă $\boldsymbol{k}$, derivata $\partial \boldsymbol{D}/\partial \boldsymbol{r} = \mathrm{i}\boldsymbol{D}\boldsymbol{k}$, formula (81.2) capătă, pentru această undă, forma

$$E_j = (\eta_{jl} + \mathrm{i}\gamma_{jlm} k_m) D_e, \quad \boldsymbol{E} = (\boldsymbol{\eta} + \mathrm{i}\boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{k}) \cdot \boldsymbol{D}. \qquad (81.3)$$

Expresia din paranteză joacă rolul tensorului impermitivității dielectrice puțin modificat. De aici rezultă că dispersia spațială determină dependența tensorului impermitivității dielectrice de vectorul de undă exact la fel cum dispersia obișnuită, adică dispersia în funcție de frecvență sau timp, duce la dependența acestui tensor de frecvență. Formula (81.3) arată că corecția la tensorul impermitivității dielectrice, care depinde liniar de vectorul de undă, este pur imaginară. Întrucît vectorul de undă, $\boldsymbol{k}$, este invers proporțional cu lungimea de undă λ (într-adevăr, $\boldsymbol{k} = (2\pi/\lambda)\boldsymbol{m}$, unde $\boldsymbol{m}$ este vectorul unitar al normalei de undă), această corecție este și ea invers proporțională cu λ. Însă deoarece singura caracteristică a unui cristal infinit, care are ca dimensiune lungimea, este dimensiunea celulei elementare, a, rezultă clar că ordinul de mărime al acestei corecții este a/λ.

Pentru frecvențele pentru care cristalul este transparent, tensorul impermitivității dielectrice, $\boldsymbol{\eta}$, este hermitic, adică partea sa reală este simetrică, iar cea imaginară antisimetrică (v. Landau și Lifșiț, 1957, § 76, relația (76.4), și Agranovici și Ghinzburg, 1965, § 1, relația (1.21)). Rezultă deci că tensorul $\boldsymbol{\gamma}$ este antisimetric în raport cu primii doi indici

$$\gamma_{jlm} = -\gamma_{ljm}, \qquad (81.4)$$

adică simetria lui internă este $\{V^2\}V$. Relația de dualitate,

$$\{V^2\}V \sim \varepsilon V^2 \qquad (81.5)$$

permite introducerea *pseudotensorului de girație*, $\mathbf{G}$, cu exactitate de pînă la un factor scalar, $\lambda/(2\pi)$ al tensorului dual $\boldsymbol{\gamma}$

$$G_{ln} = \frac{\pi}{\lambda} \delta_{lij} \gamma_{ijn}, \quad \frac{2\pi}{\lambda} \gamma_{ijn} = \delta_{ijl} G_{ln}. \qquad (81.6)$$

Acum, relația (81.3) se poate scrie sub forma

$$E_j = (\eta_{jk} + \mathrm{i}\delta_{jkl} G_{ln} m_n) D_k, \quad \boldsymbol{E} = \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{D} + \mathrm{i}\boldsymbol{D} \times \mathbf{G} \cdot \boldsymbol{m}. \qquad (81.7)$$

Să stabilim care sînt undele plane ce se pot propaga într-un mediu caracterizat de ecuația de material (81.7). Pentru aceasta vom introduce un sistem de coordonate drept, a cărui axă X_3 este orientată după vectorul normalei de undă, $\boldsymbol{m}$, iar axele X_1 și X_2 coincid cu axele principale ale secțiunii centrale a indicatricei optice a cristalului cu planul frontului de undă : X_1 cu axa principală mare, iar X_2 cu axa principală mică. În acest sistem de coordonate, primele două ecuații (81.7) capătă forma

$$E_1 = n_{01}^{-2} D_1 + \mathrm{i}G_{33} D_2,$$
$$E_2 = -\mathrm{i}G_{33}D_1 + n_{02}^{-2}D_2. \qquad (81.8)$$

În sistemul de coordonate ales

$$D_3 = 0 \text{ și } \eta_{12} = 0,$$

iar

$$\eta_{11} = n_{01}^{-2} \text{ și } \eta_{22} = n_{02}^{-2};$$

aici n_{01} și n_{02} sînt indicii de refracție ai undelor care s-ar propaga într-o direcție dată, dacă nu ar exista dispersia spațială, și anume, $n_{01} \geqslant n_{02}$.

După cum se știe, din ecuațiile Maxwell pentru unda electromagnetică plană rezultă că

$$\boldsymbol{E} - \boldsymbol{mm} \cdot \boldsymbol{E} = n^{-2} \boldsymbol{D} \qquad (81.9)$$

(v. § 34). În sistemul de coordonate ales de noi aceasta înseamnă că

$$E_1 = n^{-2}D_1 \text{ și } E_2 = n^{-2} D_2.$$

Folosindu-ne de aceasta, eliminăm pe E_1 și E_2 din ecuațiile (81.8)

$$(n_{01}^{-2} - n^{-2})D_1 + \mathrm{i}G_{33} D_2 = 0,$$
$$-\mathrm{i}G_{33} D_1 + (n_{02}^{-2} - n^{-2})D_2 = 0. \qquad (81.10)$$

Sistemul de două ecuații liniare omogene în componentele vectorului inducție, astfel obținut, are soluție nebanală numai dacă determinantul său este zero

$$(n_{01}^{-2} - n^{-2})(n_{02}^{-2} - n^{-2}) - G_{33}^2 = 0. \qquad (81.11)$$

Să examinăm mărimea

$$\rho = \frac{1}{2G_{33}} [\sqrt{(n_{02}^{-2} - n_{01}^{-2})^2 + (2G_{33})^2} - (n_{02}^{-2} - n_{01}^{-2})]. \quad (81.12)$$

Din condiția $n_{01} \geqslant n_{02}$, introdusă mai înainte, rezultă inegalitatea $|\rho| \leqslant 1$, semnul lui ρ coincizînd cu semnul lui G_{33}. Este ușor de verificat că soluțiile ecuației de gradul doi, (81.1), sînt de forma

$$\begin{aligned} n_1^{-2} &= n_{01}^{-2} - \rho G_{33}, \\ n_2^{-2} &= n_{02}^{-2} + \rho G_{33}. \end{aligned} \quad (81.13)$$

Deoarece $G_{33} \ll 1$, iar n_{01} și n_{02} sînt numere de ordinul unității, indicii de refracție n_1 și n_2 sînt egali, cu suficientă exactitate, cu

$$\begin{aligned} n_1 &= n_{01} + \frac{1}{2} n_{01}^3 \, \rho G_{33}, \\ n_2 &= n_{02} - \frac{1}{2} n_{02}^3 \, \rho G_{33}. \end{aligned} \quad (81.14)$$

Înlocuind în sistemul (81.10) soluțiile n_1^{-2} și n_2^{-2} din (81.13), găsim raportul dintre componentele vectorilor inducție $\boldsymbol{D}^{(1)}$ și $\boldsymbol{D}^{(2)}$ pentru undele care se propagă cu vitezele c/n_1 și, respectiv, c/n_2

$$\frac{D_2^{(1)}}{D_1^{(1)}} = \frac{D_1^{(2)}}{D_2^{(2)}} = \mathrm{i}\rho. \quad (81.15)$$

Forma generală a vectorilor $\boldsymbol{D}^{(1)}$ și $\boldsymbol{D}^{(2)}$, care satisfac relația (81.15) este

$$\begin{aligned} \boldsymbol{D}^{(1)} &= D^{(1)} (\boldsymbol{e}_1 + \mathrm{i}\rho \boldsymbol{e}_2) \exp [\mathrm{i}(k^{(1)} x_3 - \omega t + \varphi^{(1)})], \\ \boldsymbol{D}^{(2)} &= D^{(2)} (\mathrm{i}\rho \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2) \exp [\mathrm{i}(k^{(2)} x_3 - \omega t + \varphi^{(2)})], \end{aligned} \quad (81.16)$$

unde $\boldsymbol{D}^{(\alpha)} \exp (\mathrm{i}\varphi^{(\alpha)})$ este amplitudinea complexă, iar

$$k^{(\alpha)} = \omega n_\alpha / c \qquad (\alpha = 1, 2).$$

Vectorii inducție electrică reprezintă părțile reale ale acestor vectori complecși

$$\mathrm{Re}\,\boldsymbol{D}^{(1)} =$$
$$= D^{(1)}[\boldsymbol{e}_1 \cos(k^{(1)} x_3 - \omega t + \varphi^{(1)}) - \rho \boldsymbol{e}_2 \sin(k^{(1)} x_3 - \omega t + \varphi^{(1)})],$$
$$\mathrm{Re}\,\boldsymbol{D}^{(2)} = \tag{81.17}$$
$$= D^{(2)} [-\rho \boldsymbol{e}_1 \sin(k^{(2)} x_3 - \omega t + \varphi^{(2)}) + \boldsymbol{e}_2 \cos(k^{(2)} x_3 - \omega t + \varphi^{(2)})].$$

În orice punct fixat al spațiului, vîrfurile vectorilor inducție, definiți de aceste relații, descriu, după timpul $T = 2\pi/\omega$, niște elipse care se află în planul frontului de undă, $x_3 = \text{const}$. Într-adevăr, formulele (81.17) pot fi scrise, respectiv, în forma

$$\begin{cases} \mathrm{Re}\, D_1^{(1)} = D^{(1)} \cos(\omega t - \psi^{(1)}), \\ \mathrm{Re}\, D_2^{(1)} = \rho D^{(1)} \sin(\omega t - \psi^{(1)}); \end{cases}$$
$$\begin{cases} \mathrm{Re}\, D_1^{(2)} = \rho D^{(2)} \sin(\omega t - \psi^{(2)}), \\ \mathrm{Re}\, D_2^{(2)} = D^{(2)} \cos(\omega t - \psi^{(2)}), \end{cases} \tag{81.18}$$

în care

$$\psi^{(\alpha)} = k^{(\alpha)} x_3 + \varphi^{(\alpha)}.$$

Formulele (81.18) nu sînt altceva decît ecuațiile parametrice ale unei elipse, avînd raportul dintre axa mică și axa mare egal cu $|\rho|$ (acest raport se numește *elipticitate*). În tabelul 81.1 sînt prezentate elipsele descrise de vîrfurile vectorilor Re $\boldsymbol{D}^{(1)}$ și Re $\boldsymbol{D}^{(2)}$. Așadar, ambele unde electromagnetice care se propagă într-un cristal optic activ în direcția în care componenta normală a pseudotensorului de girație este diferită de zero, sînt polarizate eliptic; elipsele lor de polarizare au același raport al axelor, fiind însă rotite una față de alta cu 90° și parcurse în sensuri opuse.

Polarizarea eliptică se numește *dreaptă* (dextrogiră) dacă din punctul de vedere al unui observator care privește razele de lumină ce vin înspre el, vectorul $\boldsymbol{D}$ se rotește în sensul acelor de ceas, și *stînga* (levogiră), în cazul contrar*; din tabelul 81.1 se vede că pentru $G_{33} > 0$, unda care se propagă mai repede ($D^{(2)}$)

---

* Această definire tradițională a polarizării drepte și celei stîngi este acceptată în majoritatea lucrărilor (Șubnikov, Flint și Boki, 1940; Landsberg, 1957; Landau și Lifșiț, 1957; Fiodorov, 1958; Șubnikov, 1958; Nye, 1967). În ultimul timp însă se generalizează o definiție exact inversă (Landau și Lifșiț, 1967 și 1969; Berestețki, Lifșiț, Pitaevski, 1968; Feynman, 1969). Conform definiției tradiționale, vîrful vectorului $\boldsymbol{D}$, în cazul propagării unei unde polarizate drept se propagă în spațiu după filetul unui șurub stîng, pe cînd noua definiție nu mai conține acest neajuns.

are polarizare dreaptă, pe cînd pentru $G_{33} < 0$, are polarizare stîngă.

Activitatea optică apare clar în cazul propagării luminii de-a lungul axei optice a cristalului. Atunci $n_{01} = n_{02} = n_0$ și

$$\rho = \frac{|G_{33}|}{G_{33}} = \operatorname{sign} G_{33} = \begin{cases} 1, & \text{dacă } G_{33} > 0, \\ -1, & \text{dacă } G_{33} < 0. \end{cases} \tag{81.19}$$

Tabelul 81.1

Polarizarea undelor luminoase pentru diferite valori ale parametrului ρ
(unda a doua se propagă mai repede decît prima ($n_2 < n_1$))

G_{33}	$G_{33} < 0$		$G_{33} = 0$	$G_{33} > 0$	
ρ	$\rho = -1$	$-1 < \rho < 0$	$\rho = 0$	$0 < \rho < 1$	$\rho = 1$
Re $\boldsymbol{D}^{(1)}$					
Re $\boldsymbol{D}^{(2)}$					

Egalitatea (81.18) se transformă, în acest caz, în ecuația parametrică a unui cerc. Din această cauză, de-a lungul axelor optice ale cristalelor optic active se propagă unde circular-polarizate. Indicii lor de refracție, conform relației (81.14) și (81.19), sînt egali cu

$$n_1 = n_0 + \frac{1}{2} n_0^3 |G_{33}|,$$

$$n_2 = n_0 - \frac{1}{2} n_0^3 |G_{33}|. \tag{81.20}$$

Și în acest caz, pentru $G_{33} > 0$ se propagă mai repede unda polarizată drept, iar pentru $G_{33} < 0$, unda polarizată stîng. Indicele de refracție al unei unde polarizate circular stîng se notează cu nl

sau n_g (după prima literă a cuvîntului englezesc *left* sau a celui franţuzesc *gauche*), iar polarizarea dreaptă cu n_r sau n_d (englezescul *right*, franţuzescul *droit*). Evident,

$$n_l = n_0 + \frac{1}{2} n_0^3 G_{33},$$
$$n_r = n_0 - \frac{1}{2} n_0^3 G_{33}. \tag{81.21}$$

Dacă dubla refracţie a unui cristal nu este foarte mică, elipticitatea undei, $|\rho|$, se micşorează repede odată cu deviaţia normalei de undă de la axa optică a cristalului. Cînd termenii din expresia de sub radical din formula (81.12) devin egali,

$$|\rho| = \sqrt{2} - 1 \approx 0{,}414.$$

Este uşor de calculat că în cazul cristalelor uniaxe această valoare a elipticităţii se atinge pentru o deviaţie a normalei de undă cu un unghi θ, determinat din egalitatea

$$\sin\theta = \sqrt{\left|\frac{2G_{33}}{N_e^{-2} - N_o^{-2}}\right|}. \tag{81.22}$$

Deoarece G_{33} este de ordinul a $10^{-4} - 10^{-5}$, iar $N_e^{-2} - N_o^{-2}$ reprezintă, de obicei, cîteva sutimi, unghiul θ nu depăşeşte cîteva grade. Această evaluare se poate extinde şi asupra cristalelor biaxe.

În cazul în care deviaţia normalei de undă faţă de axa optică creşte în continuare, elipticitatea devine foarte mică, şi pentru calcularea ei, în loc de (81.12) se poate folosi formula aproximativă

$$\rho = \frac{G_{33}}{n_{02}^{-2} - n_{01}^{-2}}. \tag{81.23}$$

Prin urmare, undele luminoase polarizate eliptic, care se propagă în cristalele optic active, birefringente, sînt, după majoritatea covîrşitoare a direcţiilor, apropiate de cele liniar polarizate. Dimpotrivă, în cristalele optic active din sistemul cubic şi în corpurile izotrope toate undele luminoase sînt polarizate circular.

Să analizăm lumina polarizată liniar, care cade normal pe o lamă plan-paralelă transparentă, de grosime d, tăiată dintr-un cristal optic activ, perpendicular la axa optică. Să introducem un sistem de coordonate cartezian, drept, $X_1X_2X_3$, astfel încît axa

X_3 să fie orientată după normala de undă, iar axa X_1 să coincidă cu direcţia de vibraţie a luminii incidente pe lamă. Fie $x_3 = 0$ faţa anterioară (în raport cu direcţia de propagare a luminii), iar $x_3 = d$, faţa ei posterioară.

Vectorul inducţie electrică aflîndu-se exact în faţa cristalului vibrează după legea $\mathbf{e}_1 \cos \omega t$. Intrînd în cristal, unda se împarte în două unde polarizate circular, de aceeaşi intensitate: la cea levogiră vectorul inducţie este

$$\mathbf{e}_1 \cos (k^{(l)} x_3 - \omega t) - \mathbf{e}_2 \sin (k^{(l)} x_3 - \omega t),$$

iar la cea dextrogiră

$$\mathbf{e}_1 \cos (k^{(r)} x_3 - \omega t) + \mathbf{e}_2 \sin (k^{(r)} x_3 - \omega t),$$

vitezele lor fiind respectiv $\omega/k^{(l)}$ şi $\omega/k^{(r)}$. Străbătînd lama, aceste unde se reunesc din nou într-o singură undă, a cărei vibraţie imediat după lamă este reprezentată de vectorul

$$\mathbf{e}_1[\cos (k^{(l)} d - \omega t) + \cos (k^{(r)} d - \omega t)] - \mathbf{e}_2[\sin (k^{(l)} d - \omega t) - \sin (k^{(r)} d - \omega t)].$$

Efectuînd transformări trigonometrice elementare şi ţinînd cont că

$$k^{(l)} + k^{(r)} = \frac{2\omega\, n_0}{c}$$

iar

$$k^{(l)} - k^{(r)} = \frac{2\pi\, n_0^3 G_{33}}{\lambda_0}$$

în care

$$n_0 = \frac{1}{2}(n_l + n_r)$$

este indicele de refracţie mediu pentru lumina care se propagă de-a lungul axei optice, λ_0 fiind lungimea undei luminoase în vid, obţinem vectorul direcţiei vibraţiilor undei emergente sub forma

$$\left(\mathbf{e}_1 \cos \frac{\pi n_0^3 G_{33} d}{\lambda_0} - \mathbf{e}_2 \sin \frac{\pi n_0^3 G_{33} d}{\lambda_0}\right) \cos \left[\omega\left(t - \frac{n_0 d}{c}\right)\right].$$

Aceasta înseamnă că unda care părăseşte cristalul este tot liniar polarizată, vectorul polarizare fiind rotit în comparaţie cu direcţia iniţială cu unghiul

$$\psi = \frac{\pi n_0^2 G_{33} d}{\lambda_0} \tag{81.24}$$

în sensul acelor de ceas. Din această cauză, se spune că la propagarea luminii de-a lungul axei optice a cristalelor optic active se produce *rotirea planului de polarizare*; dacă $G_{33} > 0$, aceasta este o rotaţie dextrogiră, dacă $G_{33} < 0$, rotaţia este levogiră. Trebuie însă să fie foarte clar că în cristal nu se propagă nici o undă liniar polarizată cu o direcţie de polarizare care se roteşte treptat, ci două unde circular polarizate, care au viteze diferite; numai datorită interferenţei acestor unde, la ieşirea din cristal apare din nou o undă liniar polarizată, a cărei direcţie de polarizare face cu direcţia de polarizare a undei incidente unghiul ψ.

Activitatea optică a cristalelor se caracterizează adesea printr-o mărime numită *rotaţie specifică* (putere rotatorie), adică unghiul de rotire a planului de polarizare pe distanţa de 1 mm. Puterea rotatorie pentru cîteva cristale este dată în tabelul 81.4.

Activitatea optică a cristalelor şi, în particular, mărimea puterii rotatorii, depinde substanţial de frecvenţa luminii; acest fenomen se numeşte dispersia activităţii optice (dispersie rotatorie). Dacă pe o lamă care roteşte planul de polarizare trimitem lumină albă, liniar polarizată, atunci fiecare dintre componentele monocromatice ale luminii emergente va fi liniar polarizată, poziţia planului de polarizare fiind însă rotită în funcţie de lungimea de undă. În absenţa unui analizor lumina va fi percepută albă, dar dacă o trecem printr-un analizor, ea va apărea colorată, culoarea schimbîndu-se prin rotirea analizorului.

În intervalele de transparenţă a cristalului, mărimea puterii rotatorii, α, creşte cu frecvenţa luminii, ω, aproximativ ca ω^2, tensorul de giraţie, $\boldsymbol{G}$, aproximativ ca ω, iar tensorul activităţii optice, γ, depinde relativ slab de frecvenţă. Dependenţa de frecvenţă a acestor mărimi pentru cristalul de cuarţ (clasa 32) este dată în tabelul 81.2 (λ_0 — lungimea undei luminoase în vid). Se observă că activitatea optică a cristalului ca atare este cel mai comod de caracterizat prin tensorul γ. În acest scop se poate utiliza şi parametrul adimensional G_{33}/a, în care a este constanta reţelei pe direcţia de propagare a luminii.

Dacă normala la lamă face un unghi suficient de mare cu axa optică a cristalului, modificarea caracterului polarizării luminii care trece prin această lamă se va deosebi esenţial de cea examinată mai sus. Activitatea optică apare acum sub formă de dublă refracţie eliptică. Vom folosi sistemul de coordonate introdus la începutul paragrafului: axa X_3 să coincidă cu direcţia de propagare a luminii, iar axele X_1 şi X_2 cu axele principale ale secţiunii centrale a indicatricei optice cu planul frontului de undă, axa X_1 cu axa mare, iar axa X_2 cu axa mică ($n_{01} > n_{02}$).

Tabelul 81.2

Dispersia rotației specifice, α, a componentelor pseudotensorului de girație, G_{33}, a tensorului activității optice, γ_{123}, și a parametrului $G_{33}\lambda/a$ într-un cristal de cuarț

λ_0, nm	α, grad/mm	G_{33}, 10^{-5}	γ_{123}, pm	$G_{33}\ \lambda/a$	λ_0, nm	α, grad/mm	G_{33}, 10^{-5}	γ_{123}, pm	$G_{33}\ \lambda/a$
686,7	15,55	1,62	1,15	0,0134	486,1	32,69	2,37	1,185	0,0138
656,3	17,22	1,71	1,16	0,0135	430,8	42,37	2,70	1,19	0,0139
589,3	21,67	1,93	1,17	0,0136	396,9	50,98	2,97	1,20	0,0141
527,0	27,46	2,17	1,18	0,0137					

Să luăm următorul exemplu simplu : pe o lamă eliptic birefringentă cade o radiație polarizată liniar cu direcția de vibrație e_1. În cazul absenței activității optice ($G_{33} = 0$), radiația și-ar păstra polarizarea atît în lamă cît și la ieșirea din ea. Din această cauză, toate modificările caracterului polarizării unei asemenea radiații după trecerea ei prin lama cristalină, eliptic birefringentă sînt determinate exclusiv de activitatea optică a cristalului.

Pătrunzînd în cristal, unda liniar polarizată se divide în două unde eliptic polarizate, așa cum se vede din figura 81.1, *a*. Săgețile arată sensul de parcurgere a elipselor (pentru $G_{33} > 0$), iar

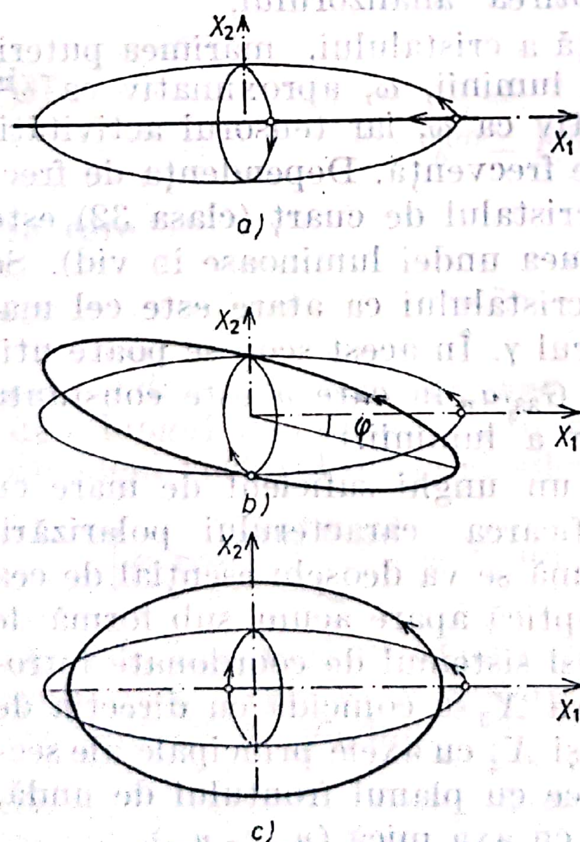


Fig. 81.1. Interferența undelor polarizate eliptic, care se propagă printr-un cristal optic activ : *a*) descompunerea la intrarea în lamă a undei polarizate liniar, avînd direcția de vibrație X_1, în două unde polarizate eliptic ; *b*) rezultatul interferenței acestor unde după ce ele au traversat lama sfert de undă ; rezultatul interferenței lor după ce au traversat o lamă jumătate de undă. Elipticitatea este mult exagerată, pentru a fi mai evidentă. Direcțiile de rotație ale elipselor sînt date pentru $G_{33} > 0$.

punctele de pe elipsă reprezintă pozițiile vîrfurilor vectorilor ***D*** ale ambelor unde, la un moment dat. Elipticitatea

$$\rho \approx G_{33}/(n_{02}^{-2} - n_{01}^{-2})$$

este mult exagerată în figură. Segmentul de dreaptă (linia groasă) reprezintă suma ambelor vibrații; după cum și era de așteptat, acestea sînt pur și simplu vibrații liniar polarizate, orientate după axa X_1.

Traversînd lama cu viteze diferite, undele capătă o anumită diferență de drum. Deoarece $n_1 > n_2$, unda descrisă de elipsa mai mică va fi în avans de fază față de unda descrisă de elipsa mai mare. De exemplu, dacă grosimea lamei este

$$d = \frac{\lambda_0}{n_1 - n_2}\left(\frac{1}{4} + m\right) \approx \frac{\lambda_0}{n_{01} - n_{02}}\left(\frac{1}{4} + m\right),$$

m fiind orice număr întreg (o asemenea lamă se numește „lamă sfert de undă"), unda mai puțin intensă o va depăși pe cea mai intensă cu un sfert de rotație. Această situație este prezentată în figura 81.1, *b*. Compunînd ambele vibrații ne vom convinge că datorită interferenței, din cristal va ieși o lumină eliptic polarizată; elipticitatea sa este aproximativ egală cu ρ, axa mare a elipsei vibrațiilor (indicată printr-o linie groasă în figura 81.1, *b*) fiind rotită față de direcția vibrațiilor radiației incidente cu un unghi $\varphi \approx \rho$, în sensul acelor de ceas.

Pentru o lamă de grosime

$$d = \frac{\lambda_0}{n_1 - n_2}\left(\frac{1}{2} + m\right)$$

(„lamă semiundă") diferența de fază devine π. La ieșirea din lamă lumina va fi polarizată eliptic, vibrațiile ei fiind reprezentate în figura 81.1, *b* prin elipsa îngroșată; elipticitatea ei este circa 2ρ, iar axa mare coincide cu direcția vibrațiilor radiației incidente.

Datorită faptului că parametrul ρ, care caracterizează aceste efecte, este mic, și efectele sînt neînsemnate. Totuși cu o aparatură suficient de bună, ele pot fi puse în evidență, iar activitatea optică a cristalelor se determină nu numai de-a lungul axelor optice ale cristalelor, ci și în acele direcții în care se manifestă o dublă refracție considerabilă (Konstantinova, Ivanov, Grucesnikov, 1969; Ivanov și Konstantinova, 1970). Ca rezultat devine posibilă determinarea suprafeței pseudotensorului de girație (v., de exemplu, figura 81.2).

Activitatea optică a cristalelor se exprimă cu ajutorul pseudotensorului de rangul doi, **G**. Deoarece el este de tip impar, activitatea optică poate apărea numai în cristalele din clasele cu centru de simetrie. În general el este nesimetric, putînd fi descompus într-o parte simetrică ($\mathbf{G}^s$) şi una antisimetrică ($\mathbf{G}^a$) (v. § 18). Valoarea lor, pentru activitatea optică a cristalelor, nu este nici pe departe egală. În ecuaţiile (81.10), care definesc caracterul polarizării undelor luminoase în cristalele optic neactive, intră componenta G_{33} a pseudotensorului de giraţie, care este complet determinată de partea lui simetrică. Din această cauză, în cadrul examinării polarizării undelor în cristal, pseudotensorul de giraţie poate fi considerat simetric.

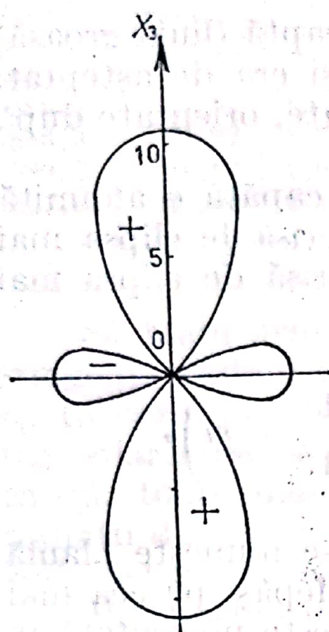


Fig. 81.2. Suprafaţa unui pseudotensor de giraţie pentru cuarţ α dextrogir, clasa 32. Plus înseamnă rotaţie dreaptă, minus, stîngă ; în 10^{-5}.

În tabelul E.7 este dată forma tensorului $\mathbf{G}^s$ pentru toate clasele cristalografice. Într-un sistem de coordonate cristalografic el are 9 forme diferite. Aceasta nu înseamnă însă deloc că există 9 clase de simetrie a activităţii optice : reducînd pseudotensorii descrişi în tabelul E.7 la axele principale *, ne convingem că sînt 4 asemenea axe. Ele sînt date în tabelul 81.3.

Tensorul de giraţie depinde de frecvenţă. Acest fenomen poartă numele de *dispersia activităţii optice* (dispersie rotatorie). Modificările tensorului de giraţie, determinate de dispersie, pot duce la rotirea vectorilor săi proprii şi deci la schimbarea orientării tensorului de giraţie faţă de cristal. Diferenţa dintre numărul de componente independente ale pseudotensorului de giraţie şi numărul de parametri care caracterizează activitatea optică dă tocmai numărul de mărimi prin care este definită orientarea pseudotensorului de giraţie faţă de cristalul dintr-o clasă dată.

Unei aceleiaşi clase de simetrie a activităţii optice îi pot corespunde cîteva clase de simetrie a dispersiei rotatorii. Astfel, dacă simetria activităţii optice este 222, simetria dispersiei ei poate fi sau 222, sau 2, sau 1. O situaţie asemănătoare am întîlnit deja,

* Un pseudotensor simetric de rangul doi se reduce la axele principale exact la fel ca un tensor simetric de rangul doi, numai că valorile lui proprii nu sînt scalari, ci pseudoscalari. Din această cauză, este necesar să urmărim dacă nu cumva, stabilind direcţia şi numerotarea vectorilor proprii nu am schimbat tripletul drept de versori într-unul stîng şi invers : dacă l-am schimbat, atunci toate valorile proprii trebuie înmulţite cu −1.

Tabelul 81.3

Simetria activității optice și a dispersiei ei

Valorile proprii ale pseudotensorului de girație	$K(\mathbf{G}(s))$	m	$K\omega(\mathbf{G}(s))$	n	Clasele cristalografice și clasele limită, care fac parte dintr-o anumită clasă de dispersie a activității optice
$G_{(1)} \neq G_{(2)} \neq G_{(3)}$	222	3	1	6	1
			2	4	2
			222	3	222
$G_{(1)} = -G_{(2)},\ G_{(3)} = 0$	$\bar{4}2m$	1	m	2	m
			$\bar{4}$	2	$\bar{4}$
			$\bar{4}2m$	1	$mm2$, $\bar{4}2m$
$G_{(1)} = G_{(2)} \neq G_{(3)}$	$\infty 2$	2	$\infty 2$	2	3, 32, 4, 422, 6, 622, ∞, $\infty 2$
$G_{(1)} = G_{(2)} = G_{(3)}$	$\infty\infty$	1	$\infty\infty$	1	23, 432, $\infty\infty$

Notații: $K(\mathbf{G}(s))$ — clasa de simetrie a activității optice, $K\omega(\mathbf{G}(s))$ — clasa de simetrie a dispersiei activității optice, m — numărul de parametri care caracterizează activitatea optică, n — numărul de componente independente ale pseudotensorului de girație simetric.

studiind simetria proprietăților dielectrice ale cristalelor. În cazul în care simetria activității optice este $\bar{4}2m$, se deosebesc tot trei clase de simetrie pentru dispersia ei: în cazul cristalelor din clasele $\bar{4}2m$ și $mm2$ vectorii proprii sînt rigid legați de elementele de simetrie ale cristalului; pentru cristalele din clasa $\bar{4}$ este fixat un singur vector propriu, care corespunde valorii proprii egale cu zero; în fine în cazul cristalelor din clasa m, vectorul propriu care corespunde valorii proprii zero se poate roti odată cu variația frecvenței, rămînînd tot timpul în planul de simetrie al cristalului, iar ceilalți doi vectori proprii se rotesc împreună cu el, astfel încît fiecare dintre ei este tot timpul situat sub un unghi de 45° față de planul de simetrie. În total există 8 clase de simetrie a dispersiei activității optice; și ele sînt date în tabelul 81.3.

Activitatea optică se manifestă în birefringența eliptică sau circulară: o radiație monocromatică traversînd un cristal se descompune în două unde polarizate eliptic sau circular, de orientare contrară, care se propagă cu viteze diferite. Pentru aceasta este necesar să fie diferită de zero componenta pseudotensorului de girație după direcția normalei de undă, $\boldsymbol{m} \cdot \mathbf{G} \cdot \boldsymbol{m}$, însă în § 44 s-a arătat care asemenea componente pot fi diferite de zero numai în direcții elicoidale (v. fig. 44.1, *d*). O direcție este elicoidală în cazul și numai în cazul în care în grupul de simetrie al cristalului nu există nici o operație care să transforme o direcție dată în ea însăși,

dar care să transforme șurubul drept în șurub stîng, și anume: inversiile, oglindirile într-un plan perpendicular pe direcția dată, o rotație oarecare cu inversie (sau de oglindire) în jurul unei axe care să coincidă cu direcția dată și, în fine, reflexiile în oricare dintre planurile ce conțin direcția dată. Direcțiile neelicoidale și cele elicoidale speciale, pentru cristalele tuturor claselor sînt date în tabelul C.1. Dacă printre operațiile de simetrie ale cristalului fac parte inversiile, adică dacă cristalul nu are centru de simetrie, atunci nici o direcție din cristal nu poate fi elicoidală, așa că cristalul nu poate fi optic activ.

Dacă printre operațiile cristalului nu există nici o operație de speța a doua, adică cristalul este enantiomorf, atunci orice direcție este o direcție elicoidală. Numai în asemenea substanțe dubla refracție eliptică sau circulară este posibilă după orice direcție *. Toate substanțele enantiomorfe pot exista, în principiu, în două modificații: dextrogiră și levogiră. Pseudotensorii de girație ai modificației dextrogire sînt contrari celor ai modificației levogire: $\mathbf{G}_{lev} = \mathbf{G}_{dextr}$ (valorile tabelate se dau, de regulă, pentru modificația dextrogiră). Din această cauză, dacă într-o anumită direcție, în una dintre modificațiile enantiomorfe se propagă cu viteză mai mare unda polarizată drept, atunci în cealaltă modificație, în direcția respectivă se propagă cu viteză mai mare unda polarizată stîng.

Activitatea optică a cristalelor se manifestă cel mai pregnant în rotația planului de polarizare a luminii care se propagă de-a lungul axei optice. În mediile girotrope și în cristalele enantiomorfe ale sistemului cubic, ea este posibilă în orice direcție, rotația specifică fiind în toate direcțiile aceeași (pentru o radiație de o anumită frecvență). În cristalele enantiomorfe din categoria medie ea este posibilă în direcția singurei axe a lor. Cristalele din categoria inferioară au două axe optice. În clasa 222 ele sînt simetric echivalente, astfel încît rotația în jurul ambelor axe se produce în aceeași direcție și cu același unghi. În clasa 1 axele optice nu au nici o legătură între ele, astfel încît rotațiile lor specifice sînt diferite. În cristalele clasei 2 se poate realiza atît prima situație, cît și a doua, după cum axa de simetrie se află în planul axelor optice sau este perpendiculară pe acest plan. După cum se vede din tabelul 81.4, ambele situații sînt realizate: prima în cristalele de acid tartric, iar cea de a doua în cristalele de zahăr și în ramnoză.

* Aceasta nu înseamnă însă că se produce obligatoriu după toate direcțiile. În cazul cuarțului, de exemplu, componenta normală a pseudotensorului de girație după direcția axei principale de simetrie și în direcțiile perpendiculare pe ea, au semne diferite. De aici rezultă existența unui con de direcții în care această componentă normală este egală cu zero, iar dubla refracție este liniară (v. fig. 81.2). Totuși simetria cristalelor de cuarț (clasa 32) nu impune existența unor asemenea direcții.

Tabelul 81.4

Rotaţia specifică a planului de polarizare α (în grad/mm)

Cristalul		Clasa	λ, nm	α
Clorat de sodiu, $NaClO_3$		23	589,3	3,16°
Sulfat dublu de potasiu şi litiu, $KLiSO_4$		6	589,3	3°26′
Sulfat de etilendiamină, $C_2H_4(NH_2)_2 \cdot H_2SO_4$		422	589,3	15°30′
Diacetilfenolftaleină, $C_{20}H_{12}O_4(C_2H_2O)_2$		422	589,3	19,7°
Cuarţ, SiO_2		32	589,3	21,67°
Cinabru, HgS		32	750	325°
Periodat de sodiu, $NaIO_4 \cdot 3H_2O$		3	589,3	23°8′
Tiogalat de argint, $AgGaS_2$	[100]	$\bar{4}2m$	497,4	522°
Tiogalat de cadmiu, $CdGa_2S_4$	[100]	$\bar{4}$	487,2	17,3°
	[100]			11,6°
Sare Seignette, $KNa(C_4H_4O_6) \cdot 4H_2O$		222	589,3	−1,35°
$(NH_4)Na(C_4H_4O_6) \cdot 4H_2O$		222	589,3	+1,55°
Azotit de sodiu, $NaNO_2$		*mm*2	632,8	+15,7°
Acid tartric, $H_2C_4H_4O_6$ (ambele axe optice)		2	589,3	11,4°
Zahăr, $C_{12}H_{22}O_{11}$	I axă optică	2	589,3	22°
	II axă optică			− 6,4°
Ramnoză, $C_6H_{12}O_5 \cdot H_2O$	I axă optică	2	589,3	+12,9°
	II axă optică			+ 5,4°

Să ne referim acum la cristalele fără centru de simetrie şi la mediile ale căror grupuri de simetrie conţin operaţii de speţa a doua. Unul dintre aceste grupuri, şi anume ∞m, interzice existenţa direcţiilor elicoidale şi, prin urmare, şi activitatea optică. Într-adevăr, în acest caz, orice direcţie se află într-unul dintre planurile de simetrie şi, din această cauză, nu poate fi direcţie elicoidală. Deoarece activitatea optică este dată de către un pseudotensor de rangul doi, teorema lui Hermann interzice activitatea optică şi în cristalele din clasele $3m$, $4mm$, $6mm$, cu toate că în ele există direcţii elicoidale. Din teorema lui Hermann rezultă şi imposibilitatea activităţii optice în cristalele din clasele $\bar{6}$, $\bar{6}m2$ şi $\bar{4}3m$: înlocuind în aceste clase axele de ordinul trei cu axe de ordin infinit, obţinem clasele limită, fără centru de simetrie, ∞/m, ∞/mm şi, respectiv, $\infty\infty/m$.

Aşadar, numai patru clase, care au operaţii de speţa a doua, permit activitatea optică: m, $mm2$, $\bar{4}$ şi $\bar{4}2m$. Direcţiile care coincid cu axele $\bar{4}$, sau care se află în planurile de simetrie, nu sînt elicoidale. Într-adevăr, toate cristalele din aceste clase au planuri reciproc perpendiculare, care constau din direcţiile în care activitatea optică nu apare, pentru că simetria tensorului lor de giraţie este $\bar{4}2m$. Oricare direcţie elicoidală dreaptă, din cristalele de acest tip, este transformată prin operaţiile de simetrie de speţa a doua într-o direcţie elicoidală stîngă şi invers. Din aceasta cauză, direc-

țiile elicoidale drepte și stîngi, din aceste cristale, sînt, dacă ne putem exprima astfel, în cantități egale. Rotirea planului de polarizare a luminii care se propagă de-a lungul axei optice este posibilă numai în două clase de acest tip : m și $mm2$ și numai cu condiția ca axele optice să nu se afle în planurile de simetrie. În acest caz, mărimea rotației este la fel după ambele axe optice, dar sensurile lor sînt inverse unul față de altul. Figura 81.3 ilustrează

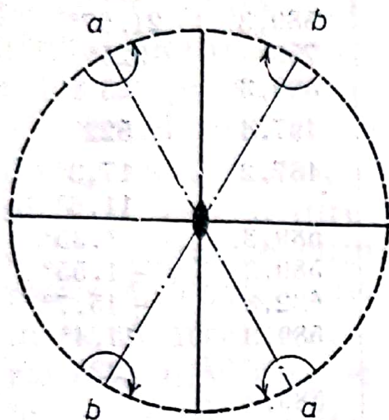


Fig. 81.3. Rotația planului de polarizare a luminii care se propagă de-a lungul axelor optice într-un cristal din clasa $mm2$. Proiecție stereografică. Cu liniuță și punct sînt trasate axele optice, cu săgeți rotunde în jurul lor— sensurile de rotație a planului de polarizare. După axa aa se observă rotația levogiră, după axa bb, rotația dextrogiră, de aceeași intensitate.

această concluzie pe exemplul rotațiilor planului de polarizare pentru cristalele din clasa $mm2$. Nu demult ea a fost observată într-un cristal de azotit de sodiu, care aparține acestei clase (Chern, Phillips, 1970) și în germanatul de zinc și sodiu, Na_2ZnGeO_4, clasa m (Kozîrev, Ghilvarg, Greciușnikov, Belov, 1973).

Dacă într-un cristal uniax al unei clase optic active, indicii de refracție N_o și N_e devin egali între ei pentru o anumită lungime de undă, atunci rotația planului de polarizare a luminii de această lungime de undă se poate produce în oricare dintre direcțiile pe care le permite simetria activității optice. Astfel, în cazul unui cristal de tiogalat de argint, $AgGaS_2$ (clasa $\bar{4}2m$) dubla refracție își schimbă semnul pentru lungimea de undă $\lambda = 4974$ Å. La această lungime de undă Hobden (Hobden, 1968) a observat rotația planului de polarizare; în cazul propagării luminii după axele cristalofizice X_1 și X_2, rotația specifică are, după cum era de așteptat, semne opuse (v. fig. 44.4). Observații analoage au fost constatate și la cristalul de tiogalat de cadmiu (clasa $\bar{4}$); în figura 81.4 sînt date rezultatele acestor observații.

Să trecem la observarea părții antisimetrice a pseudotensorului de girație, $\mathbf{G}^{(a)}$. Un pseudotensor antisimetric de rangul doi este dual față de un vector polar obișnuit : $\varepsilon\{V^2\} \sim V$; din această cauză, partea simetrică a pseudotensorului de girație poate fi diferită de zero numai în cazul cristalelor a căror simetrie admite existența unui vector de material, adică în cazul cristalelor și texturilor care fac parte din clasele piroelectrice

$$1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 6,\ \infty,\ m,\ mm2,\ 3m,\ 4mm,\ 6mm,\ \infty m.$$

Printre clasele enumerate, pe lîngă clasele care admit activitatea optică în accepţiunea obişnuită, sînt şi unele care nu o admit

$$3m,\ 4mm,\ 6mm,\ \infty m.$$

Cristalele şi texturile unor asemenea clase sînt denumite materiale *slab optic active*; Agranovici şi Ghinzburg (1965) utilizează termenul de *slab girotrope*. Pseudotensorii lor de giraţie sînt antisimetrici. Caracterul polarizării luminii care se propagă prin cristalele slab optic active este în cel mai înalt grad original. Vectorii inducţie electrică ai tuturor undelor luminoase, care se propagă prin asemenea cristale, sînt polarizaţi liniar. Dacă activitatea optică ar lipsi complet, atunci şi vectorul intensitate a cîmpului electric al undei luminoase ar fi liniar polarizat (chiar dacă, în general, ar ieşi din planul frontului de undă), astfel încît întreaga undă s-ar putea considera liniar polarizată. Din cauza că există activitatea optică, vectorul intensitate a cîmpului electric este legat de vectorul inducţie electrică prin ecuaţiile de material (81.7), care, în cazul unei activităţi slabe, capătă forma

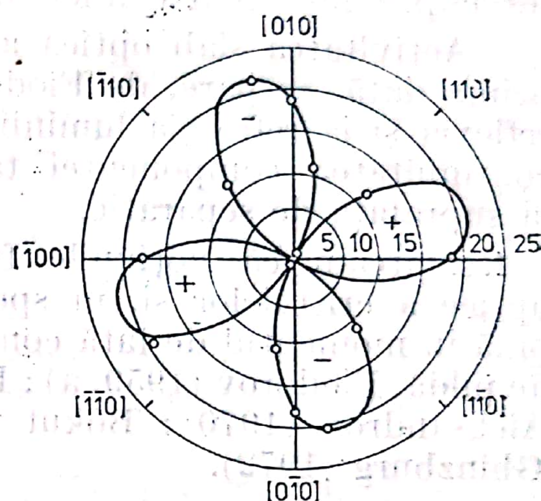


Fig. 81.4. Rotaţia specifică a planului de polarizare pentru un cristal de tiogalat de cadmiu (clasa $\bar{4}$) în planul (001); se vede că pseudotensorul de giraţie are simetria $\bar{4}2m$, însă axele sale de simetrie de ordinul doi nu coincid cu axele cristalofizice X_1, adică [100], şi X_2, adică [010].

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{D} + i m \boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{D} \tag{81.25}$$

$\boldsymbol{h}$ fiind vectorul dual al pseudotensorului antisimetric $\mathbf{G}$

$$G_{jk} = \delta_{jkl}\, h_l, \qquad h_i = \frac{1}{2}\, \delta_{ijk}\, G_{jk}\,; \tag{81.26}$$

în cristalele din categoria inferioară el este paralel cu axa optică. Pentru undele care se propagă de-a lungul axei optice şi pentru toate undele ordinare în general, $\boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{D} = 0$, astfel încît vectorul $\boldsymbol{E}$

al undei ordinare este polarizat liniar. În cazul undei extraordinare însă, vectorul $\boldsymbol{E}$ este polarizat eliptic, elipsa găsindu-se în planul care trece prin axa optică a cristalului și prin normala la undă, adică este perpendiculară pe frontul de undă. Așa și trebuie să fie : aceasta este singura formă de polarizare eliptică posibilă într-o direcție neelicoidală. Vectorul intensitate, $\boldsymbol{E}$, devine de două ori pur longitudinal în decursul unei perioade, fiind totodată în aceste momente foarte mic ($E_{\text{long}} \sim hE_{\text{ampl}}$), corespunzător elipticității foarte mici (de ordinul lui h).

Activitatea slab optică a cristalelor a fost observată pentru prima dată, se pare, de Fiodorov (1959). Ea trebuie să apară la reflexia și la refracția luminii, întrucît condițiile la limită impun continuitatea componentei tangențiale a vectorului intensitate la suprafața de separație.

Remarcăm că noțiunile fundamentale ale teoriei activității optice a cristalelor și, în special, problema condițiilor la limită pînă în momentul de față constituie încă subiect de discuție — v., de pildă, Fiodorov (1959, a) ; Bokut, Serdiukov și Fiodorov (1970) ; Aleksandrov (1970) ; Bokut și Serdiukov (1971) ; Agranovici și Ghinzburg (1972).

§ 82. ACTIVITATEA OPTICĂ ARTIFICIALĂ

Prin activitate optică artificială (indusă) se înțelege apariția sau modificarea activității optice sub influența acțiunilor exterioare : a cîmpului electric sau a cîmpului magnetic, a tensiunilor mecanice etc. Nu demult, s-a observat efectul cîmpului electric asupra activității optice a cristalelor, prevăzută mai de mult (Jeludev, 1964) — efectul electrogirator (Vloh, 1971) (un fenomen asemănător în unii seignettoelectrici — variația semnului activității optice la repolarizarea cristalului — a fost menționat de Șuvalov și Ivanov, 1964) : într-un cîmp electric de intensitate $\boldsymbol{E}$, pseudotensorul de girație al cristalului este egal cu

$$G_{ij}(\boldsymbol{E}) = G_{ij}^{(0)} + A_{ijk}\, E_k + B_{ijkl}\, E_k\, E_l. \tag{82.1}$$

Simetria internă a pseudotensorului $\mathbf{A}$ este egală cu $\varepsilon\,[V^2]\,V$ (neglijăm activitatea optică slabă). Acesta este un tensor de tip par (forma lui este dată în tabelul E.14) ; el coincide, pentru orice subsistem, cu forma tensorului $V\,[V^2]$ pentru clasa enantiomorfă a acestui subsistem (de comparat cu tabelul E.11). Cu toate că tensorilor de tip par nu le este proprie egalarea cu zero, acest tensor se anulează pentru două subsisteme : $\infty\infty m$ și $m3m$. Prin

urmare, în corpurile izotrope efectul electrogirator liniar nu este posibil. Printre clasele în care acest efect este posibil sînt multe în care activitatea optică este interzisă; evident, ele sînt cele mai comode pentru a-l observa.

Pseudotensorul **B**, de simetrie internă $\varepsilon\,[V^2]^2$ este de tip impar; de aceea, în cristalele cu centru de simetrie nu este posibilă electrogirarea pătratică. Un tensor de aceeaşi formă descrie influenţa (pînă acum, se pare, neobservată) tensiunilor mecanice asupra activităţii optice (Ranganath, Ramaseshnan, 1969).

Activitatea optică artificială sub acţiunea unui cîmp magnetic este, dimpotrivă, posibilă şi în corpurile izotrope, fiind cunoscută de mult timp. Încă din 1846 Faraday a descoperit că, dacă asupra unui corp transparent, optic izotrop, neactiv, supus unui cîmp magnetic, cade în direcţia liniilor cîmpului magnetic o radiaţie luminoasă, liniar polarizată, atunci lumina emergentă este tot liniar polarizată, însă planul său de polarizare este rotit faţă de planul de polarizare al luminii incidente cu un unghi proporţional cu lungimea drumului luminii prin substanţă şi cu intensitatea cîmpului magnetic.

Activitatea optică Faraday se explică prin faptul că într-un cîmp magnetic tensorul impermitivităţii dielectrice a cristalelor (şi al corpurilor izotrope) variază întrucîtva. Din termodinamica proceselor ireversibile rezultă că corecţia complexă, $\Delta\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\zeta} + i\boldsymbol{\xi}$, la tensorul impermitivităţii dielectrice, determinată de un cîmp magnetic de intensitate $\boldsymbol{H}$, satisface relaţia

$$\Delta\eta_{jk}(\boldsymbol{H}) = \Delta\eta_{kj}(-\boldsymbol{H})$$

sau

$$\zeta_{jk}(\boldsymbol{H}) = \zeta_{kj}(-\boldsymbol{H}),\quad \xi_{jk}(\boldsymbol{H}) = \xi_{kj}(-\boldsymbol{H}). \tag{82.2}$$

Totodată, pentru cristalele transparente, această corecţie (ca şi întregul tensor $\boldsymbol{\eta}$) este hermitică, adică partea lui reală este simetrică, iar cea imaginară, antisimetrică

$$\zeta_{jk}(\boldsymbol{H}) = \zeta_{kj}(\boldsymbol{H}),\quad \xi_{jk}(\boldsymbol{H}) = -\,\xi_{kj}(\boldsymbol{H}). \tag{82.3}$$

Comparînd condiţia (82.2) cu (82.3) găsim că $\boldsymbol{\zeta}$ sînt funcţii pare, iar $\boldsymbol{\xi}$ sînt funcţii impare de intensitatea cîmpului magnetic. În primă aproximaţie,

$$\zeta_{jk} = C_{jklm} H_l\, H_m,\qquad \boldsymbol{\zeta} = \mathbf{C} : \boldsymbol{HH}; \tag{82.4}$$

$$\xi_{jk} = f_{jkl}\, H_l,\qquad \boldsymbol{\xi} = \mathbf{f}\cdot\boldsymbol{H}. \tag{82.5}$$

Tensorii $\mathbf{C}$ şi $\mathbf{f}$ satisfac relaţiile

$$C_{jklm} = C_{kjlm} = C_{jkml} = C_{kjlm}, \tag{82.6}$$

$$f_{jkl} = -f_{kjl}. \tag{82.7}$$

Evident, cel mai important este efectul legat de corecţia $\mathrm{i}\mathbf{f} \cdot \boldsymbol{H}$ la tensorul impermitivităţii dielectrice, $\boldsymbol{\eta}$, liniară în raport cu $\boldsymbol{H}$.

Să aplicăm relaţiile de dualitate şi să înlocuim pseudotensorul $\mathbf{f}$, antisimetric în raport cu doi indici, cu tensorul de rangul doi, $\mathbf{F}$

$$F_{il} = \frac{1}{2}\,\delta_{ijk}\, f_{jkl}, \quad f_{jkl} = \delta_{jkm}\, F_{ml}. \tag{82.8}$$

Atunci, în loc de (82.5), obţinem

$$\xi_{jk} = \delta_{jkl}\, F_{lm}\, H_m, \quad \boldsymbol{\xi} = \mathbf{I} \times \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{H}, \tag{82.9}$$

deci componentele tensorului impermitivităţii dielectrice, modificat de cîmpul magnetic, dacă se ţine cont numai de termenii liniari ai dezvoltării în $\boldsymbol{H}$, sînt egale cu $\boldsymbol{\eta} + \mathrm{i}\mathbf{I} \times \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{H}$, iar relaţia care leagă între ele intensitatea şi inducţia cîmpului electric ale undei luminoase, care se propagă printr-un cristal ce se află în cîmp magnetic, capătă forma

$$E_j = (\eta_{jk} + \mathrm{i}\delta_{jkl}\, F_{lm}\, H_m) D_k, \quad \boldsymbol{E} = \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{D} + \mathrm{i}\boldsymbol{D} \times \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{H}. \tag{82.10}$$

Ea aminteşte foarte mult de ecuaţia de material a unui mediu optic activ, (81.7), şi ar coincide total cu ea, dacă vectorii axiali $\mathbf{F} \cdot \boldsymbol{H}$ şi $\mathbf{G} \cdot \boldsymbol{m}$ ar fi identici. Mărimii $\boldsymbol{m} \cdot \mathbf{G} \cdot \boldsymbol{m}$, care caracterizează cantitativ activitatea optică în direcţia $\boldsymbol{m}$, îi corespunde pseudoscalarul $\boldsymbol{m} \cdot \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{H}$.

Aşadar, un mediu transparent — izotrop sau anizotrop — în cîmp magnetic devine optic activ : undele luminoase care se propagă prin el sînt polarizate eliptic sau circular. Acesta este tocmai *efectul Faraday*. În general el este foarte slab — de obicei mult mai slab decît activitatea optică naturală, astfel încît poate fi observat numai în mediile optic izotrope sau în cazul în care lumina se propagă de-a lungul axei optice a cristalului. În acest caz, activitatea optică artificială provocată de cîmpul magnetic se manifestă prin rotaţia planului de polarizare : planul de polarizare

al luminii polarizate liniar, trecînd printr-un strat de grosime d, se rotește față de direcția sa inițială cu unghiul

$$\psi = \frac{\pi n_o^3 d}{\lambda_0} F_{il} m_i H_l = \frac{\pi n_o^3 d}{\lambda_0} \boldsymbol{m} \cdot \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{H} \qquad (82.11)$$

în sensul rotației acelor de ceas. Aici n_o este indicele de refracție al undelor care se propagă după axa optică, λ_0 este lungimea de undă a luminii în vid, $\boldsymbol{m}$ — vectorul unitate al normalei de undă, $\mathbf{F}$ — tensorul *coeficienților Faraday*, iar $\boldsymbol{H}$ — intensitatea cîmpului magnetic.

Dacă mediul este optic izotrop, $F_{il} = F\delta_{il}$, iar rotirea Faraday a planului de polarizare este caracterizată de *constanta Verdet*,

$$V = \pi n^3 F/\lambda_0;$$

în cazul substanțelor nemagnetice (sticlă, apă, sulfură de carbon) ea este de ordinul unei secunde de arc pe Oersted × centimetru. În substanțele magnetice efectul este mult mai însemnat; el este proporțional, în acest caz, nu cu intensitatea cîmpului magnetic, ci cu magnetizarea materialului.

Asupra luminii care se propagă într-o direcție $\boldsymbol{m}$, care este perpendiculară pe vectorul axial $\mathbf{F} \cdot \boldsymbol{H}$, cîmpul magnetic nu are, în primă aproximație, nici o influență; în acest caz, trebuie să se țină cont de corecțiile pătratice în raport cu $\boldsymbol{H}$ ale componentelor tensorului impermitivității dielectrice, determinate de formula (82.4). Tensorul

$$\zeta = \mathbf{C} : \boldsymbol{HH}$$

este real și simetric; el descrie dubla refracție artificială: fie în formă pură, dacă direcția de propagare a luminii coincide cu axa optică a cristalului, fie, în caz contrar, pe fondul dublei refracții naturale, care este cu mult mai intensă. Acesta este *efectul Cotton-Mouton*, complet analog efectului Kerr, studiat în § 77, însă mult mai slab (excepție fac cristalele fero- și antiferomagnetice — v. Smolenski, Pisarev, Sini, Kolpakova, Titova, 1972). $\mathbf{C}$ este *tensorul Cotton-Mouton*, de simetrie internă $[V^2]^2$.

Capacitatea unei substanțe de a căpăta în cîmp magnetic activitate optică se caracterizează prin tensorul de material $\mathbf{F}$. Deoarece această proprietate o prezintă și substanțele care au un centru de simetrie (în particular izotrope), adică fără structură magnetică, tensorul Faraday, $\mathbf{F}$, este de tip par. Rezultă deci că $\mathbf{F} \cdot \boldsymbol{H}$ este un vector de tip magnetic, adică este un vector axial,

41—c.292 31

care își inversează sensul la inversia timpului. Deoarece vectorul normalei de undă, $\boldsymbol{m}$, la inversia timpului își inversează și el sensul, $\boldsymbol{m} \cdot \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{H}$ este, ca și $\boldsymbol{m} \cdot \mathbf{G} \cdot \boldsymbol{m}$ un pseudotensor de tip electric, adică de simetrie $\infty\infty 1'$ (v. § 68) (pentru amănunte asupra tensorului Faraday, v. Ranganath, 1972).

Activitatea optică Faraday diferă ca simetrie substanțial de activitatea optică naturală. În timp ce activitatea optică naturală se produce numai în direcțiile elicoidale, activitatea optică Faraday este posibilă și în direcții neelicoidale. Într-adevăr, un corp cu centru de simetrie rămîne la fel și în cîmp magnetic, pentru că și cîmpul magnetic are centru de simetrie; deci în acesta nu există direcții elicoidale și, în ciuda acestui fapt, rotirea planului de polarizare se produce. În cristale și în corpurile izotrope, introduse în cîmp magnetic, toate direcțiile pentru care componenta normală a vectorului axial $\mathbf{F} \cdot \boldsymbol{H}$ este diferită de zero, sînt direcții axiale (v. §§ 14, 44 și anexa C). După aceste direcții se deosebesc nu vitezele undelor polarizate dextrogir și levogir, ci vitezele undelor pentru care sensul de parcurgere a cercului sau elipsei de polarizare coincide cu sensul vectorului axial sau este opus lui. Prin urmare, în cadrul activității optice naturale, a electrogirației sau a ipoteticei piezogirații birefringența circulară (sau eliptică) este *elicoidală*, pe cînd în cazul efectului Faraday, în mediile optic inactive aceasta este *axială*. Deosebirea dintre aceste două tipuri apare clar în evidență dacă lumina care a traversat mediul activ este reflectată pe o oglindă pentru a o dirija pe drumul pe care l-a parcurs, dar de data aceasta în sens invers. Prin reflexie sensul propagării elicoidale a luminii se inversează (lumina polarizată drept se transformă în lumină polarizată stîng), orientarea axială rămînînd însă neschimbată. Din această cauză, dacă dubla refracție circulară sau eliptică este de tip elicoidal, atunci diferența de drum căpătată de cele două unde în sensul direct de propagare a luminii se anulează prin propagarea în sens invers; dimpotrivă, în cazul dublei refracții de tipul axial diferența de drum cînd lumina se propagă în sensul invers continuă să crească, ceea ce face posibilă utilizarea reflexiei multiple pentru amplificarea efectului.

Termenul „axială" nu poate fi însă luat ad literam. Dacă problema ar consta numai în axialitatea direcției, atunci dubla refracție circulară de tip axial s-ar observa la propagarea luminii după axele optice ale cristalelor claselor centrale din categoria medie ($\bar{3}$, $4/m$, $6/m$), în absența cîmpului magnetic, ceea ce însă nu se observă în realitate, în aceste condiții. Din interpretarea efectului Faraday rezultă clar că drept direcții de dublă refracție circulară sau eliptică, de tip axial, pot servi numai direcțiile axiale magnetice, adică direcțiile a căror simetrie nu depășește ∞/mm'.

O asemenea disimetrie a direcţiei este posibilă nu numai într-un mediu nemagnetic sub acţiunea unui cîmp magnetic exterior, ci şi în cristalele feromagnetice (v. § 70). Din această cauză, în continuare, activitatea optică Faraday (axială) se tratează fără a ţine seama dacă este artificială sau naturală. Cu toate că explicaţia activităţii optice Faraday a cristalelor feromagnetice (v. Krincik şi Cetkin, 1969) se deosebeşte întrucîtva de explicaţia efectului Faraday, expusă mai sus, în ambele cazuri simetria este asemănătoare.

Tabelul 82.1

Proprietăţile optice ale direcţiilor, reprezentarea lor simbolică şi simetria lor

Natura luminii ce se propagă în direcţia dată	La schimbarea direcţiei de propagare, viteza luminii		
	nu se modifică		se modifică
	pentru lumina cu o anumită orientare elicoidală	pentru lumina cu o anumită orientare axială	
lumină naturală	$\infty/mm1'$		$\infty/m'm$
polarizată liniar	$mm1'$		mmm'
polarizată circular	$\infty21'$	∞/mm'	$\infty2'$
polarizată eliptic	$2221'$	$m'm'm$	$2'2'2$

Toate cazurile logic posibile ale proprietăţilor optice ale direcţiilor sînt grupate în tabelul 82.1. Pe lîngă direcţiile deja cunoscute ale dublei refracţii circulare de tip elicoidal (simetrie $\infty21'$) şi axial (∞/mm'), în tabel mai este dat încă un tip de direcţii, în care nu există nici dublă refracţie elicoidală, nici dublă refracţie axial-circulară, însă după care lumina se propagă cu viteze diferite în sensul direct şi în sensul invers. Operaţiile care intră în grupul ei de simetrie $\infty/m'm$ transformă şurubul drept în şurub stîng precum şi o orientare axială în alta, fără a modifica însă direcţia de propagare. Disimetria necesară pentru dubla refracţie liniară este studiată în § 25 (acolo ea se numeşte pur şi simplu dublă refracţie). Combinarea disimetriilor necesare pentru dubla refracţie liniară şi pentru cea circulară de un anumit tip duce la dubla refracţie eliptică de tipul respectiv. Tabelul 82.1 permite determinarea proprietăţilor

optice ale oricărei direcţii din orice cristal. Pentru aceasta este necesar să se găsească grupul de simetrie magnetică a direcţiei date

$$G_{\rm dir} = G \cap \infty/mm1', \tag{82.12}$$

G fiind grupul de simetrie magnetică a cristalului, iar axa ∞ este paralelă cu direcţia care ne interesează pe noi. Dacă cristalul este supus acţiunilor exterioare — tensiunii uniaxiale, cîmpului electric sau magnetic — atunci în relaţia (82.12), în loc de G trebuie să punem pe

$$G_{\rm cr,solicit} = G \cap G_{\rm solicit}, \tag{82.13}$$

în care $G_{\rm solicit}$ este grupul de simetrie magnetică al solicitării : $\infty/mm1'$, $\infty m1'$ sau ∞/mm', respectiv. În continuare trebuie determinat care dintre cele zece grupuri de simetrie magnetică, $G_{\rm optic}$ date în tabelul 82.1 sînt supragrupuri ale grupului de simetrie al direcţiei determinate din formula (82.12)

$$G_{\rm optic} \supseteq G_{\rm dir} \tag{82.14}$$

şi să se determine care dintre ele este cel inferior — el va determina tocmai simetria proprietăţilor optice ale direcţiei date. Pentru aceasta se poate utiliza schema de subordonare reciprocă a acestor grupuri — figura 82.1. Ca de obicei, interzicerea efectului are un caracter absolut, însă din faptul că el este permis, încă nu rezultă nicidecum că el se produce cu adevărat. În orice caz, pentru cristalele transparente, cu ordonare magnetică, ne putem aştepta la proprietăţi optice extrem de neaşteptate ; unele dintre ele sînt date în tabelul prezentat, însă pînă acum probabil că nu au fost încă observate.

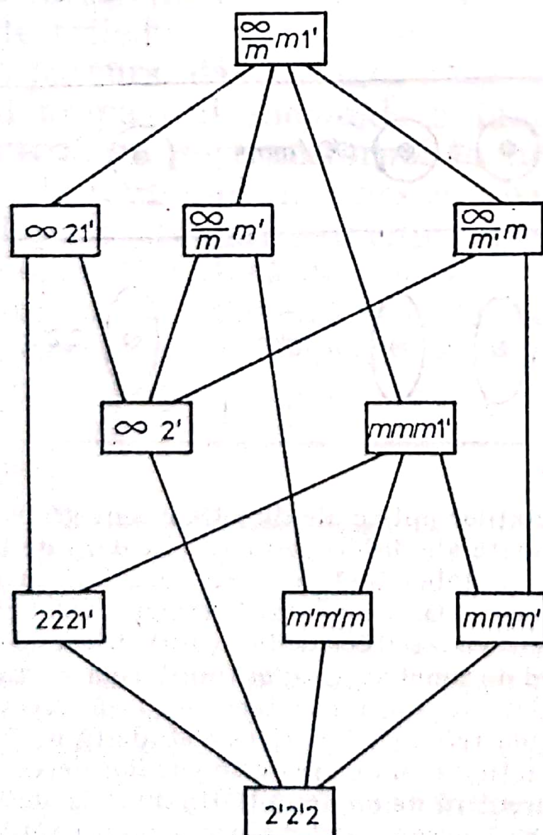


Fig. 82.1. Schema subordonării reciproce a grupurilor de simetrie ale proprietăţilor optice ale direcţiilor.

§ 83. ACTIVITATEA ACUSTICĂ A CRISTALELOR

Efectul dispersiei spaţiale asupra propagării undelor elastice în cristalele fără centru de simetrie şi în corpurile girotropice determină *activitatea acustică* — analogul acustic al activităţii optice (Andronov, 1960). Legea generalizată a lui Hooke, (51.3), cînd se ia în consideraţie dispersia spaţială, capătă, în primă aproximaţie, forma

$$\sigma_{ij} = c_{jkl}\, \varepsilon_{kl} + b_{ijkln} \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial x_n}. \tag{83.1}$$

Tensorul giraţiilor acustice, **b**, care caracterizează dispersia spaţială a proprietăţilor elastice ale unui cristal, la fel ca şi **c**, este simetric în raport cu prima pereche de indici (ij) şi cu cea de a doua (kl); aceasta ne permite să transcriem (83.1) în forma

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} + b_{ijkln} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_l\, \partial x_n} \tag{83.2}$$

(de comparat cu trecerea de la formula (51.3) la formula (51.13)). Plecînd de la aceasta, găsim modificarea ecuaţiilor elastodinamicii (51.14), datorită luării în considerare a dispersiei spaţiale

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i\, \partial x_l} + b_{ijkln} \frac{\partial^3 u_k}{\partial x_i\, \partial x_l\, \partial x_n} = \rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2}. \tag{83.3}$$

Pentru undele plane,

$$\boldsymbol{u} = A\, \boldsymbol{p} \exp\left[(2\pi \mathrm{i}/\lambda)\,(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r} - vt)\right],$$

iar ecuaţiile (83.3) au forma

$$\begin{gathered}[c_{ijkl}\, m_i\, m_l + (2\pi \mathrm{i}/\lambda) b_{ijkln}\, m_i\, m_l\, m_n]\, p_k = \rho v^2 p_j, \\ [\boldsymbol{m}\cdot\mathbf{c}\cdot\boldsymbol{m} + (2\pi \mathrm{i}/\lambda)\, \boldsymbol{m}\cdot\mathbf{b} : \boldsymbol{mm}]\cdot\boldsymbol{p} = \rho v^2 \boldsymbol{p}.\end{gathered} \tag{83.4}$$

Acestea nu sînt altceva decît ecuaţiile lui Christoffel pentru cristalele acustic active. Ele arată că în acustica cristalelor, ca şi în teoria activităţii optice, dispersia spaţială duce, în primă aproximaţie, la apariţia unei corecţii pur imaginare pentru tensorul

c, iar absenţa absorbţiei exprimă faptul că tensorul complex $c_{\lambda\mu} + (2\pi i/\lambda) b_{\lambda\mu n} m_n$ este hermitic, deci partea sa imaginară este antisimetrică

$$b_{\lambda\mu n} = -b_{\mu\lambda n}.$$

Prin urmare, simetria internă a tensorului $\mathbf{b}$ este $\{[V^2]^2\}V$. Întrucît în ecuaţia fundamentală (83.4) tensorul $\mathbf{b}$ intră sub forma $\boldsymbol{m} \cdot \mathbf{b} \ \vdots \boldsymbol{mm}$, cea mai importantă este partea lui simetrică în raport cu primul, cu al patrulea şi cu al cincilea indice — *tensorul simetrizat al giraţiei acustice*. Pentru el faptul că este antisimetric în raport cu permutarea primei şi celei de a doua perechi de indici se reduce la a fi antisimetric în raport cu al doilea şi al treilea indice, astfel încît simetria sa internă va fi egală cu $\{V^2\}\{V^3\}$. Utilizînd relaţia de dualitate, $\{V^2\}\{V^3\} \sim \varepsilon V[V^3]$, aceasta permite introducerea *pseudotensorului de giraţie acustică*, $\mathbf{g}$

$$g_{stln} = \frac{\pi}{\lambda} \delta_{sjk}\, b_{ijkln}.$$

$$\frac{2\pi}{\lambda} b_{ijkln} = \delta_{jks}\, g_{siln}. \qquad (83.5)$$

Prin intermediul pseudotensorului $\mathbf{g}$ se defineşte *vectorul axial al giraţiei acustice*, care depinde de direcţia normalei de undă, $\boldsymbol{m}$,

$$\boldsymbol{Q} = \mathbf{g} \ \vdots \ \boldsymbol{mmm}, \quad Q_s = g_{siln}\, m_i\, m_l\, m_n. \qquad (83.6)$$

Acesta, împreună cu tensorul lui Christoffel,

$$\mathbf{M} = \boldsymbol{m} \cdot \mathbf{c} \cdot \boldsymbol{m},$$

introdus în § 56, permit aducerea ecuaţiei Christoffel, (83.4), la următoarea formă finală

$$(M_{jk} + i\delta_{jkl}\, Q_l) p_k = \rho v^2\, p_j,$$

$$\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{p} + i\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{Q} = \rho v^2 \boldsymbol{p}. \qquad (83.7)$$

Aşadar, pseudotensorul giraţiei acustice, $\mathbf{g}$, de simetrie internă $\varepsilon V[V^3]$, determină, de fapt, în cea mai mare parte, activitatea acustică a cristalelor. În cazul general (adică pentru crista-

lele din clasa 1) el are 30 de componente independente, pe cînd în cazul tensorului **b**, de simetrie $\{[V^2]^2\}\, V$, care descrie activitatea acustică în mod complet, numărul lor este 45.

Pseudotensorii de material $\varepsilon V\, [V^3]$ nu sînt daţi în anexa E (pentru grupurile cristalografice, care constau numai din operaţii de speţa întîi, forma pseudotensorilor $\varepsilon V\, [V^3]$ coincide cu forma tensorilor $V\, [V^3]$, daţi în tabelul E.17 ; pseudotensorul de rangul patru, de formă generală, a fost studiat de Barkovski, 1970). Forma acestor pseudotensori pentru toate clasele cristaline fără centru de simetrie o putem obţine prin descompunerea lor în părţi ireductibile (v. § 52) — metode ce se bazează pe teoria reprezentărilor grupurilor. Vom reprezenta pseudotensorul **g** sub forma

$$\mathbf{g} = \mathbf{g}^{\{4\}} + \mathbf{g}^{\{31\}}_{\dots};$$

$$g^{\{4\}}_{ijkl} = g_{(ijkl)}, \quad g^{\{31\}}_{ijkl} = g_{ijkl} - g_{(ijkl)}; \tag{83.8}$$

prin urmare, pseudotensorul $\mathbf{g}^{\{4\}}$ este simetric în raport cu toţi indicii, pe cînd $\mathbf{g}^{\{31\}}$ numai în raport cu ultimii trei indici, iar în cazul simetrizării în raport cu toţi indicii el se anulează.

Se poate arăta (pentru aceasta este necesară teoria reprezentărilor) că pseudotensorul $\mathbf{g}^{\{4\}}$ constă din părţi care se transformă ca pseudotensorul $\widetilde{I}$, pseudodeviatorul **D** şi pseudononorul **N**, iar $\mathbf{g}^{\{31\}}$ din părţi care se transformă ca vectorul **V**, pseudodeviatorul **D** şi septorul $\widetilde{\mathbf{S}}$. Dintre aceste mărimi, tensorii de simetrii interne ca $\mathbf{g}^{\{4\}}$ şi $\mathbf{g}^{\{31\}}$ se constituie, cu o precizie de pînă la nişte coeficienţi numerici, univoc, şi anume

$$\begin{aligned} g_{ijkl} = {} & \widetilde{I}^{\{4\}}\, \delta_{(ij}\, \delta_{kl)} + \widetilde{D}^{\{4\}}_{(ij}\, \delta_{kl)} + \widetilde{N}^{\{4\}}_{ijkl} + \\ & + \delta_{ni(j}\, \delta_{kl)}\, V^{\{31\}}_{n} + (\widetilde{D}^{\{31\}}_{i(j}\, \delta_{kl)} - \widetilde{D}^{\{31\}}_{(ij}\, \delta_{kl)}) + \delta_{ni(j}\, \widetilde{S}^{\{31\}}_{kl)n}. \end{aligned} \tag{83.9}$$

Aici indicii superiori arată că termenul dat aparţine de tensorul $\mathbf{g}^{\{4\}}$ sau $\mathbf{g}^{\{31\}}$ al dezvoltării. Înlocuind în această dezvoltare formele generale ale tensorilor ireductibili, invarianţi faţă de grupurile cristalografice (v. tab. 47.3), obţinem forma generală a pseudotensorilor **g** pentru grupurile respective.

Substituind dezvoltarea (83.9) şi (83.6), găsim forma generală pentru vectorul axial al giraţiei acustice

$$\begin{aligned} Q_i = {} & \widetilde{I}^{\{4\}}\, m_i + \delta_{ijn}\, m_j\, V^{\{31\}}_{n} + \frac{1}{2}(\widetilde{D}^{\{4\}}_{ij} + \widetilde{D}^{\{31\}}_{ij})\, m_j + \\ & + \frac{1}{2}(\widetilde{D}^{\{4\}}_{kl} - \widetilde{D}^{\{31\}}_{kl})\, m_i\, m_k\, m_l + \delta_{ijn}\, \widetilde{S}^{\{31\}}_{kln}\, m_j\, m_k\, m_l + \widetilde{N}^{\{4\}}_{ijkl}\, m_j\, m_k\, m_l, \end{aligned} \tag{83.10}$$

$$Q = \tilde{I}^{\{4\}} m + m \times \mathrm{I}^{\{31\}} + \frac{1}{2}(\tilde{\mathrm{D}}^{\{4\}} + \tilde{\mathrm{D}}^{\{31\}}) \cdot m +$$

$$+ \frac{1}{2}[m \cdot (\tilde{\mathrm{D}}^{\{4\}} - \mathrm{D}^{\{31\}}) \cdot m]\, m + m \times \mathrm{S}^{\{31\}} : mm + \mathrm{N}^{\{4\}} : mmm.$$

Folosind formula (83.10), se poate găsi vectorul Q pentru orice clasă cristalografică fără centru de simetrie și pentru orice direcție a normalei de undă, m, și forma sistemului de ecuații Christoffel, (83.7). Pentru a-l rezolva, vom considera că problema corespunzătoare a acusticii cristalelor, cînd nu se ține cont de activitatea acustică, este deja rezolvată, cu alte cuvinte, că ne sînt cunoscute vitezele v_{0l} și vectorii de material ai polarizării, $p^{(0l)}$, pentru undele elastice, care satisfac ecuațiile

$$M \cdot p = \rho v^2 p$$

și vom determina cum se modifică aceștia sub influența activității acustice a cristalului.

Vom examina mai întîi cazul în care normala de undă, m, nu este axă acustică a cristalului. Într-un sistem de coordonate construit pe vectorii p^{0l}, sistemul (83.7) capătă forma

$$\begin{aligned} &\rho(v_{01}^2 - v^2)\, p_1 + \mathrm{i}Q_3 p_2 - \mathrm{i}Q_2 p_3 = 0, \\ &-\mathrm{i}Q_3 p_1 + \rho(v_{02}^2 - v^2)\, p_2 + \mathrm{i}Q_1 p_3 = 0, \\ &\mathrm{i}Q_2 p_1 - \mathrm{i}Q_1 p_3 + \rho(v_{03}^2 - v^2)\, p_3 = 0. \end{aligned} \qquad (83.11)$$

Raportul $Q/(\rho v^2)$ este totdeauna mic (de ordinul lui a/λ, unde a este parametrul rețelei, λ fiind lungimea de undă); vom considera însă că sînt mici și rapoartele de tipul $Q/[\rho(v_{02}^2 - v_{01}^2)$, pentru aceasta fiind necesar ca normala de undă să fie suficient de îndepărtată de axa acustică. În aceste condiții sistemul (83.11) poate fi rezolvat prin metodele calculului aproximativ. Ele dau

$$v_1^2 = v_{01}^2 - \frac{Q_2^2}{\rho^2(v_{03}^2 - v_{01}^2)} - \frac{Q_3^2}{\rho^2(v_{03}^2 - v_{01}^2)}, \qquad (83.12)$$

$$p^{(1)} = p^{(01)} + \frac{\mathrm{i}Q_3}{\rho(v_{02}^2 - v_{01}^2)}\, p^{(02)} - \frac{\mathrm{i}Q_2}{\rho(v_{03}^2 - v_{01}^2)}\, p^{(03)}. \qquad (83.13)$$

Prin permutări ciclice, din (83.12) obţinem pe v_2 şi pe v_3, iar din (83.13), pe $\boldsymbol{p}^{(2)}$ şi pe $\boldsymbol{p}^{(3)}$. Compararea acestor formule cu formulele corespunzătoare ale teoriei activităţii optice a cristalelor — (81.13) şi (81.16) — arată că fenomenul studiat aminteşte foarte mult de propagarea luminii într-un cristal optic activ după o direcţie suficient de îndepărtată de axa optică (cînd $n_{02}^{-2} - n_{02}^{-2} \gg |G_{33}|$). Activitatea acustică se manifestă şi prin faptul că polarizarea undelor în loc de liniară devine eliptică, elipticitatea fiind mică — ordinul de mărime al raportului dintre parametrul ce caracterizează activitatea şi parametrul care caracterizează anizotropia este egal cu $G_{33}/(n_{02}^{-2} - n_{01}^{-2})$, în teoria activităţii optice, şi cu $Q_3/[\rho(v_{02}^2 - v_{01}^2)$, în teoria activităţii acustice. Variaţia vitezei determinată de activitate este însă în ambele cazuri proporţională cu produsul dintre acest raport şi parametrul de activitate, adică este cu două ordine de mărime mai mic.

Este interesant un caz particular al formulei (83.13), cînd unul dintre vectorii $\boldsymbol{p}^{(0l)}$ coincide cu normala de undă, adică dacă nu s-ar lua în considerare activitatea acustică, unda ar fi longitudinală. Atunci axa mare a elipsei vibraţiilor este orientată după normala de undă, iar cea mică se află în planul frontului de undă (de comparat cu elipsa vibraţiilor vectorului $\boldsymbol{E}$, în cazul activităţii optice slabe, §81). Această situaţie se realizează, probabil, aproape pe toate normalele longitudinale din cristalele clasei 1 : pe de-o parte, conform teoremei lui F. I. Fiodorov (§ 56) fiecare asemenea cristal are cel puţin două normale longitudinale, $\boldsymbol{m}^{(l)}$, pe de altă parte, nu există nici o bază să ne aşteptăm ca $\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{m}^{(l)}) \| \boldsymbol{m}^{(l)}$.

Activitatea acustică, la fel cu cea optică, se manifestă cel mai pregnant la propagarea undei elastice după una dintre axele acustice ale cristalului. Pentru analizarea ecuaţiilor Christoffel, (83.7), de această dată le vom raporta la un sistem de coordonate ai cărui doi versori, $\boldsymbol{e}_1$ şi $\boldsymbol{e}_2$, se află în planul vectorilor proprii ai tensorilor $\boldsymbol{M}$, iar drept al treilea versor serveşte vectorul propriu izolat, $\boldsymbol{p}^{(00)}$, al tensorului $\boldsymbol{M}$, şi anume, versorii $\boldsymbol{e}_1$ şi $\boldsymbol{e}_2$ îi vom lua astfel încît să devină zero componenta Q_2 a vectorului $\boldsymbol{Q}$

$$\begin{gathered}\rho(v_{01}^2 - v^2)\, p_1 + iQ_3\, p_2 = 0,\\ -iQ_3\, p_1 + \rho(v_{01}^2 - v^2)\, p_2 + iQ_1 p_3 = 0,\\ -iQ_1 p_2 + \rho(v_{00}^2 - v^2)\, p_3 = 0.\end{gathered} \tag{83.14}$$

Undei care are viteza v_{00}, iar polarizarea $p^{(00)}$, cînd se ţine cont de activitatea acustică, îi corespunde o undă polarizată eliptic cu

elipticitatea mică; viteza ei, v_0, şi vectorul de polarizare, $p^{(0)}$, se calculează după formulele

$$v_0^2 = v_{00}^2 - \frac{Q_1^2}{\rho^2(v_{01}^2 - v_{00}^2)}, \qquad (83.15)$$

$$p^{(0)} = p^{(00)} - \frac{iQ_1}{\rho^2(v_{01}^2 - v_{00}^2)} e_2. \qquad (83.16)$$

Mulţimii de unde care se propagă cu viteza v_{01} şi care sînt polarizate în direcţiile $p^{(\varphi)}$, cînd se ţine cont de activitatea acustică, le corespund însă două unde, polarizate aproape circular; vitezele lor, v_1 şi v_2, şi polarizările $p^{(1)}$ şi $p^{(2)}$, sînt date de formulele

$$v_{1,2}^2 = v_{01}^2 \pm \frac{Q_3}{\rho} - \frac{Q_1^2}{2\rho(v_{00}^2 - v_{01}^2)}, \qquad (83.17)$$

$$p^{(1,2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e_1 \mp i\left(1 \mp \left(\frac{Q_1^2}{2Q_3\rho(v_{00}^2 - v_{01}^2)}\right)e_2 \pm \frac{Q_1}{\rho(v_{00}^2 - v_{01}^2)} p^{(00)}\right)\right]. \qquad (83.18)$$

Şi în acest caz, pentru evaluarea corectă a termenilor de ordinul întîi de mărime din cadrul vectorilor de polarizare, trebuie să se ia în consideraţie termenii cu două ordine de mărime mai mici în expresiile pentru viteze.

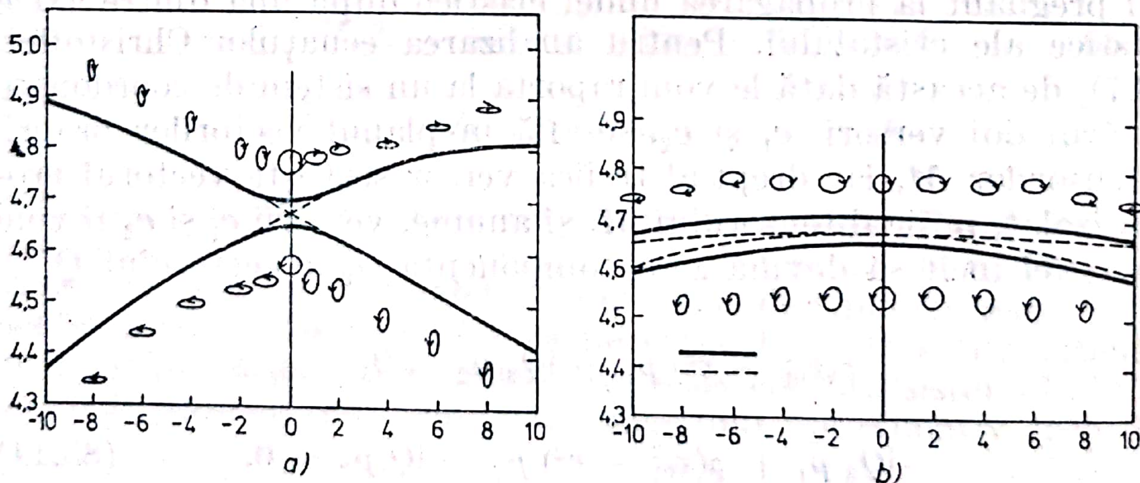


Fig. 83.1. Suprafeţele vitezelor normale ale undelor elastice transversale, de frecvenţă 28,9 GHz şi polarizarea lor în apropierea axei X_3: în cuarţ α, b) în cuarţ α convenţional. Pe axa absciselor sînt luate unghiurile măsurate de la axa X_3 spre axa X_2(în grade); pe axa ordonatelor — vitezele în km/s. Pe elipsele de polarizare direcţia orizontală este paralelă cu axa X_2, cea verticală, cu axa X_1 Liniile punctate sînt aceleaşi fragmente ale suprafeţelor pentru undele de frecvenţă mai joasă (Pine, 1971).

După cum rezultă din formulele (83.17), activitatea acustică a cristalelor, la fel cu cea optică, duce la întreruperea suprafeţelor vitezelor normale în punctele de ieşire a axelor optice. Acest fapt se vede, în particular, în figura 83.1.

Aşa cum s-a remarcat în § 56, toate axele de simetrie de ordin mai înalt decît doi sînt axe acustice longitudinale. Dacă pentru direcţia $\boldsymbol{m}$ a unei asemenea axe pseudotensorul de giraţie acustică, $\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{m})$, este diferit de zero, el este, evident, paralel cu ea

$$\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{m}) = Q\boldsymbol{m}.$$

În acest caz, situaţia se simplifică foarte mult : unda longitudinală în general nu se modifică ($v_0 = v_{00}$, $\boldsymbol{p}^{(0)} = \boldsymbol{p}^{(00)}$), iar undele transversale sînt polarizate strict circular

$$v_{1,2}^2 = v_{01}^2 \pm \frac{Q}{\rho}, \tag{83.19}$$

$$\boldsymbol{p}^{(1,2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}_1 \mp \boldsymbol{e}_2). \tag{83.20}$$

Prin urmare, aici se observă rotaţia planului de polarizare a undelor elastice transversale. În acest caz, rotaţia specifică a planului de polarizare este egală cu

$$\alpha = \frac{Q\omega}{2\rho v_{01}^3}. \tag{83.21}$$

Deoarece direcţiile cele mai bune pentru observarea activităţii optice a cristalelor sînt axele acustice, o importanţă deosebită o capătă mărimea vectorului giraţie acustică în direcţiile acestor axe. În legătură cu aceasta vom menţiona că în cazul cristalelor din clasa $\bar{4}3m$, în direcţiile axelor acustice ⟨100⟩ şi ⟨111⟩, vectorul $\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{m})$ devine zero, deoarece aceste direcţii se află în planurile de simetrie.

Polarizarea undelor elastice transversale, care se propagă în cristalele de cuarţ α şi β (clasele 32 şi, respectiv, 622) de-a lungul axei principale de simetrie şi în direcţii apropiate de ea, precum şi forma sectoarelor corespunzătoare ale suprafeţelor vitezelor normale ale acestor cristale sînt date în figura 83.1 (pentru cuarţul β calculul este făcut convenţional : s-au utilizat datele pentru cuarţul α, însă coeficientul c_{14} s-a luat egal cu zero).

Activitatea acustică a cristalelor, ca şi cea optică, se exprimă cu ajutorul unui parametru adimensional, a/λ, care este raportul dintre constanta reţelei şi lungimea de undă. De aceea, efectele remarcabile ale activităţii acustice se pot obţine cu unde elastice hiperacustice, de lungime de undă de ordinul micrometrului şi frecvenţă de ordinul gigahertzului (Lemanov şi Smolenski, 1972). Studiul împrăştierii Mandelştan-Brilloiun a luminii pe undele hipersonore, polarizate circular, de frecvenţă 28,9 GHz, care se propagă de-a lungul axei de simetrie, într-un cristal de cuarţ, a permis determinarea rotaţiei specifice a planului de polarizare a hipersunetului — la această frecvenţă ea a fost de $1{,}06 \cdot 10^5$ grad/cm (Pine, 1971). Nu este greu deci să se determine componentele tensorilor care caracterizează activitatea acustică a cuarţului: $g_{3333} = 5{,}58 \cdot 10^9$ dyn/cm², $b_{31233} = 1{,}44 \cdot 10^4$ dyn/cm. Pentru comparaţia cu activitatea optică, este nimerit să se treacă la alte mărimi: confruntarea formulelor (81.24) şi (83.21) arată că raportul $g_{3333}/\rho v^2 = 9{,}57 \cdot 10^{-3}$ este analog produsului $n_0^2 G_{33}$, raportul $b_{31233}/\rho v^2 = 247$ pm — cu produsul $n_0^2 \gamma_{123}$, în fine, raportul $g_{3333}\lambda/ /a\rho v^2 = 2{,}88$ — cu parametrul $n_0^2 G_{33}\lambda/a$. Prin urmare, prin compararea acestor mărimi cu valorile G_{33}, γ_{123} şi $G_{33}\lambda/a$, date în tabelul 81.2, ultimele trebuie să fie înmulţite cu $n_0^2 \approx 2{,}4$. Însă şi după aceasta se vede că activitatea acustică se manifestă în cuarţ aproape de 100 de ori mai intens decît cea optică.

CAPITOLUL 10

UNELE PROBLEME GENERALE ALE FIZICII CRISTALELOR

§ 84. SARCINILE EXPERIMENTALE ALE FIZICII CRISTALELOR

Printre problemele fizicii teoretice a cristalelor, ce trebuie rezolvate, un loc important îl ocupă determinarea direcţiilor în care o anumită proprietate a unui cristal capătă valoarea maximă sau valoarea minimă. Astfel de probleme apar în toate domeniile fizicii cristalelor; însă pentru a ne da seama de metodele lor de rezolvare este suficient să ne mărginim numai la o singură proprietate oarecare. În acest scop, aici vor fi studiate trei probleme din teoria efectului piezoelectric.

P r o b l e m a 1. Cum va trebui să fie tăiată o lamă dintr-un anumit cristal piezoelectric, astfel încît densitatea de sarcină, care apare pe armăturile sale scurtcircuitate, sub acţiunea unei tensiuni uniaxiale, perpendiculare la planul lamei, să fie maximă? Să se considere cazurile: a) un cristal de cuarţ (clasa 32); b) un cristal din clasa de simetrie piezoelectrică longitudinală, $\bar{4}3m$; c) un cristal sau o textură din clasa de simetrie piezoelectrică longitudinală ∞m.

S o l u ţ i e. Teoria generală. După cum s-a arătat în § 59, densitatea de sarcină este proporţională, în aceste condiţii, cu o expresie de gradul trei, M, în funcţie de componentele vectorului unitar al normalei la lamă, $\boldsymbol{n}$

$$M(\boldsymbol{n}) = \mathbf{f} \vdots \boldsymbol{nnn} = f_{ikl}\, n_i\, n_k\, n_l, \tag{84.1}$$

unde $\mathbf{f}$ este tensorul efectului piezoelectric longitudinal (v. § 58). Trebuie determinaţi vectorii $\boldsymbol{n}$, unitari, adică cei care satisfac condiţia

$$\Phi(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{n} - 1 = 0, \tag{84.2}$$

şi astfel încît funcţia $M(\boldsymbol{n})$ să fie extremală.

Pentru rezolvarea problemei, vom forma funcţia

$$F = M - \frac{3}{2}\lambda\Phi,$$

în care λ este multiplicatorul lui Lagrange, deocamdată nedeterminat, iar coeficientul 3/2 se adaugă pentru simplificarea calculelor ulterioare. Valorile căutate ale componentelor n_i şi ale multiplicatorului se determină ca soluţii ale unui sistem care constă din patru ecuaţii : ecuaţia (84.2) şi cele trei ecuaţii corespunzătoare ecuaţiei vectoriale $\partial F/\partial \boldsymbol{n} = 0$. Ultima ecuaţie poate fi scrisă sub forma

$$\mathfrak{f} : \boldsymbol{nn} - \lambda \boldsymbol{n} = 0, \qquad f_{ikl}\, n_k\, n_l - \lambda n_i = 0. \tag{84.3}$$

Înmulţind scalar ambele părţi ale ecuaţiei (84.3) cu $\boldsymbol{n}$, obţinem

$$\lambda = \mathfrak{f} \vdots\, \boldsymbol{n\,n\,n} = f_{ikl} n_i n_k n_l. \tag{84.4}$$

Evident, aici n_i este o componentă a unuia dintre vectorii $\boldsymbol{n}^{(s)}$, pentru care funcţia $M(\boldsymbol{n})$ atinge valoarea extremă (sau cel puţin staţionară), $\lambda_{(s)} = M(\boldsymbol{n}^{(s)})$.

În continuare efectuăm calculele pentru cazuri separate concrete.

S o l u ţ i a p r o b l e m e i 1 a. Vom înlocui în ecuaţia (84.3) componentele care sînt diferite de zero ale tensorului efectului piezoelectric longitudinal, pentru cristalele din clasa 32 (conform tabelului 58.2). Notînd

$$f_{111} = -f_{122} = -f_{212} = -f_{221} = f$$

obţinem

$$f(n_1^2 - n_2^2) - \lambda n_1 = 0, \tag{84.5, a}$$

$$-2f\, n_1 n_2 - \lambda n_2 = 0, \tag{84.5, b}$$

$$-\lambda n_3 = 0. \tag{84.5, c}$$

Formula (84.4) capătă forma

$$\lambda = f n_1 (n_1^2 - 3n_2^2).$$

Vom începe rezolvarea sistemului (84.5) cu ecuaţia (84.5, c). Evident că sau $\lambda = 0$, sau $n_3 = 0$. În primul caz, din (84.5, a) rezultă $n_1^2 = n_2^2$, ceea ce este comparabil cu (84.5, b), numai dacă $n_1 = n_2 = 0$. Acum, din (84.2) obţinem $n_3 = \pm 1$. Prin urmare,

primele soluţii sînt următoarele

$$\left.\begin{array}{l} \boldsymbol{n}^{(1)} = \boldsymbol{e}_3 \\ \boldsymbol{n}^{(2)} = -\boldsymbol{e}_3 \end{array}\right\} \begin{array}{l} \boldsymbol{n}^{(1)}, \boldsymbol{n}^{(2)} \parallel \langle 0001 \rangle \\ \lambda_{(1)} = \lambda_{(2)} = 0. \end{array} \tag{84.6}$$

Să considerăm cea de-a doua posibilitate: $n_3 = 0$. Din (84.5, b) rezultă că ori $n_2 = 0$, ori $2fn_1 + \lambda = 0$. În primul caz $n_1 = \pm 1$, iar $\lambda = \pm f$. În al doilea caz, sînt posibile toate patru combinaţiile: $n_1 = \pm 1/2$, $n_2 = \pm \sqrt{3}/2$. În acest caz, $\lambda = -2n_1 f$. Aşadar, se obţin următoarele soluţii

$$\left.\begin{array}{l} \boldsymbol{n}^{(3)} = \boldsymbol{e}_1, \\ \boldsymbol{n}^{(4)} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{e}_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{e}_2, \\ \boldsymbol{n}^{(5)} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{e}_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{e}_2, \end{array}\right| \begin{array}{l} \boldsymbol{n}^{(3)}, \boldsymbol{n}^{(4)}, \boldsymbol{n}^{(5)} \parallel \langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle \\ \lambda_{(3)} = \lambda_{(4)} = \lambda_{(5)} = f; \end{array}$$

$$\left.\begin{array}{l} \boldsymbol{n}^{(6)} = -\boldsymbol{e}_1, \\ \boldsymbol{n}^{(7)} = \frac{1}{2}\boldsymbol{e}_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{e}_2, \\ \boldsymbol{n}^{(8)} = \frac{1}{2}\boldsymbol{e}_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{e}_2, \end{array}\right| \begin{array}{l} \boldsymbol{n}^{(6)}, \boldsymbol{n}^{(7)}, \boldsymbol{n}^{(8)} \parallel \langle \bar{2}110 \rangle \\ \lambda_{(6)} = \lambda_{(7)} = \lambda_{(8)} = -f. \end{array} \tag{84.7}$$

Vectorii $\boldsymbol{n}^{(3)}$, $\boldsymbol{n}^{(4)}$ şi $\boldsymbol{n}^{(5)}$ sînt echivalenţi simetric; nu este de mirare că tuturor le corespunde o aceeaşi valoare unică, $\lambda = f$. Cei trei vectori cărora le corespunde $\lambda = -f$ sînt, de asemenea, fireşte, echivalenţi simetric. Este clar că soluţiile (84.7) corespund extremalelor funcţiei $M(\boldsymbol{n})$, care depinde de semnul coeficientului $f = f_{111}$. Soluţia (84.6) nu corespunde însă unui extremum. Prin urmare, drept direcţii extremale pentru efectul piezoelectric longitudinal în cristalele de cuarţ (şi în general pentru cristalele cu simetria efectului piezoelectric longitudinal $\bar{6}m2$) servesc axele de ordinul al doilea. Toate acestea se văd din proiecţia stereografică a suprafeţei septorului unitar, $S^0[\bar{6}m2]$ (v. fig. 47.4); trebuie numai să fim atenţi la aranjarea axelor de coordonate.

S o l u ţ i a p r o b l e m e i 1 b. Pentru cristalele cu simetria $\bar{4}3m$ a efectului piezoelectric longitudinal, ecuaţiile (84.3)

capătă forma

$$2fn_2n_3 - \lambda n_1 = 0,$$
$$2fn_3n_1 - \lambda n_2 = 0, \tag{84.8}$$
$$2fn_1n_2 - \lambda n_3 = 0,$$

în care s-a notat $f_{123} = f$. Conform lui (84.4) $\lambda = 6fn_1n_2n_3$. Substituind valoarea lui λ în ecuaţiile (84.8), obţinem sistemul

$$n_2n_3(1 - 3n_1^2) = 0,$$
$$n_3n_1(1 - 3n_2^2) = 0, \tag{84.9}$$
$$n_1n_2(1 - 3n_3^2) = 0.$$

Ne putem uşor convinge că sistemul (84.9) are trei seturi de soluţii simetric echivalente

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{n}^{(1,2)} &= \pm \boldsymbol{e}_1, \\ \boldsymbol{n}^{(3,4)} &= \pm \boldsymbol{e}_2, \\ \boldsymbol{n}^{(5,6)} &= \pm \boldsymbol{e}_3 \end{aligned}\right\} \begin{aligned} &\boldsymbol{n}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{n}^{(6)} \parallel \langle 100 \rangle, \\ &\lambda_{(1)} = \ldots = \lambda_{(6)} = 0; \end{aligned} \tag{84.10}$$

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{n}^{(7)} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3), \\ \boldsymbol{n}^{(8)} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_3), \\ \boldsymbol{n}^{(9)} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(-\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_3), \\ \boldsymbol{n}^{(10)} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(-\boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3), \end{aligned}\right| \begin{aligned} &\boldsymbol{n}^{(7)}, \ldots, \boldsymbol{n}^{(10)} \parallel \langle 111 \rangle, \\ &\lambda_{(7)} = \ldots = \lambda_{(10)} = \frac{2f}{\sqrt{3}}; \end{aligned} \tag{84.11}$$

$$\left.\begin{aligned} n^{(11)} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(-e_1 + e_2 + e_3), \\ n^{(12)} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(e_1 - e_2 + e_3), \\ n^{(13)} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(e_1 + e_2 - e_3), \\ n^{(14)} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(-e_1 - e_2 - e_3), \end{aligned}\right| \begin{aligned} & n^{(11)}, \ldots, n^{(14)} \| \langle \bar{1}\bar{1}\bar{1} \rangle, \\ & \lambda_{(11)} = \ldots = \lambda_{(14)} = -\frac{2f}{\sqrt{3}}. \end{aligned} \tag{84.12}$$

Evident, nici în acest caz setul de soluţii (84.10) nu corespunde nici unui extrem, pe cînd seturile (84.11) şi (84.12) corespund valorilor extremale ale funcţiei $M(\boldsymbol{n})$: astfel, dacă coeficientul $f = f_{123}$ este pozitiv, atunci pentru un $\boldsymbol{n}^{(s)}$ oarecare din setul (84.11), funcţia $M(\boldsymbol{n})$ atinge valoarea sa maximă, iar pentru un $\boldsymbol{n}^{(s)}$ din setul (84.12) valoarea minimă. Anizotropia efectului piezoelectric longitudinal, care are asemenea simetrie, este reprezentată de suprafaţa septorului $S^0[\bar{4}3m]$, a cărui proiecţie stereografică este reprezentată în figura 47.3.

S o l u ţ i a p r o b l e m e i 1 c. Această problemă este mai uşor de rezolvat dacă nu se apelează la metoda multiplicatorilor Lagrange nedeterminaţi. Îl vom exprima pe M ca funcţie de unghiul $\theta = \arccos(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{e}_3)$, folosindu-ne de formulele (58.10) şi de tabelul 47.4

$$M(\theta) = F_V \cos\theta + \frac{1}{8} F_S (3\cos\theta + 5\cos 3\theta). \tag{84.13}$$

Aici F_V şi F_S sînt coeficienţii dezvoltării tensorului $\mathbf{f}$ în raport cu tensorii unitari ireductibili, $V^0[\infty m]$ şi $S^0[\infty m]$. Problema se reduce la determinarea valorii unghiului θ, pentru care funcţia $M(\theta)$ este extremă. Pentru aceasta este necesar să se rezolve ecuaţia

$$\frac{dM}{d\theta} = 0,$$

care se aduce în forma

$$\sin\theta \left[-F_V + \frac{3}{16} F_S (4 - 5\sin^2\theta) \right] = 0. \tag{84.14}$$

Pentru orice valori ale raporturilor dintre F_V şi F_S ea are soluţiile

$$\theta_{(1)} = 0, \;\; \theta_{(2)} = \pi, \;\; M(\theta_{(1,2)}) = \pm(F_V + F_S), \tag{84.15}$$

iar atunci cînd raportul F_V/F_S este suficient de mic în valoare absolută, şi anume, dacă este valabilă inegalitatea,

$$\frac{3}{4} \geqslant F_V/F_S \geqslant -\frac{3}{16}, \tag{84.16}$$

precum şi soluţiile

$$\theta_{(3)} = \arcsin\sqrt{\frac{4}{5} - \frac{16}{5}(F_V/F_S)}, \qquad \theta_{(4)} = \pi - \theta_{(3)},$$

$$M(\theta_{(3,4)}) = \pm\left(\frac{11}{3}F_V - F_S\right)\sqrt{\frac{1}{5} + \frac{16}{5}(F_V/F_S)}. \tag{84.17}$$

Ambele cazuri — ale celor două extremuri şi ale celor patru extremuri — se pot vedea în figura 58.1. Pentru delimitarea tipului vectorial de tipul septorial de anizotropie a efectului piezoelectric longitudinal cu simetria ∞m, este normal să se folosească tocmai numărul de extremuri; astfel, în cazul în care este satisfăcută inegalitatea (84.16) are loc o anizotropie septorială, iar în cazul în care aceasta nu este satisfăcută, tipul vectorial de anizotropie.

Acest exemplu arată că în ciuda faptului că direcţiile legate de elementele de simetrie sînt deseori nişte extremuri, totuşi valorile extreme pot fi atinse şi după direcţiile care nu au nimic comun cu elementele de simetrie.

P r o b l e m a 2. Cum să se taie dintr-un cristal piezoelectric dat o lamă, astfel încît densitatea de sarcină care apare pe armăturile scurtcircuitate, sub acţiunea unei întinderi uniaxiale într-o anumită direcţie, cuprinsă în planul plăcii, să fie extremă.

S o l u ţ i e. Aşa cum s-a arătat în § 59, densitatea de sarcină este, în aceste condiţii, proporţională cu expresia

$$M(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{n} \cdot \mathbf{d} : \boldsymbol{qq} = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{n}, \tag{84.18}$$

în care $\boldsymbol{n}$ este vectorul unitar al normalei la lamă, $\mathbf{d}$ este tensorul coeficienţilor piezoelectrici, $\boldsymbol{q}$ — vectorul unitar al direcţiei de întindere, iar vectorul $\boldsymbol{A} = \mathbf{d} : \boldsymbol{qq}$. Trebuie găsit vectorul $\boldsymbol{n}$, unitar

şi perpendicular pe $\boldsymbol{q}$

$$\Phi_1(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{n} - 1 = 0, \qquad \Phi_2(\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{n} = 0 \qquad (84.19)$$

şi astfel încît funcţia $M(\boldsymbol{n})$ să fie o extremală. Să compunem, în acest scop, funcţia

$$F = M - \frac{1}{2}\lambda\Phi_1 - \mu\Phi_2,$$

în care λ şi μ sînt multiplicatori Lagrange nedeterminaţi. Vectorii $\boldsymbol{n}$, pe care îi căutăm, satisfac ecuaţia (84.19) şi ecuaţia

$$\frac{\partial F}{\partial n} = \boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{n} - \mu\boldsymbol{q} = 0. \qquad (84.20)$$

Înmulţim ecuaţia (84.20) scalar cu $\boldsymbol{q}$ şi, avînd în vedere că $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n} = 0$ găsim $\lambda = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{q}$. Înmulţind scalar (84.20) cu $\boldsymbol{n}$, obţinem $\lambda = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{n}$. În fine, înmulţind scalar (84.20) cu $\boldsymbol{A}$, îl vom calcula pe

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{n} = \sqrt{A^2 - (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{q})^2}.$$

Înlocuind toate valorile găsite în (84.20), obţinem soluţia problemei puse

$$\boldsymbol{n} = \frac{(\mathbf{I} - \boldsymbol{q}\boldsymbol{q})\cdot\boldsymbol{A}}{\sqrt{A^2 - (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{q})^2}}, \qquad M = \sqrt{A^2 - (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{q})^2}. \qquad (84.21)$$

P r o b l e m a 3. Dintr-un cristal piezoelectric este tăiată o lamă a cărei orientare este dată de vectorul unitar al normalei $\boldsymbol{n}$ la planul ei. Care trebuie să fie orientarea întinderii uniaxiale, cuprinsă în planul lamei, pentru ca să fie extremă a) densitatea de sarcină care apare pe armăturile ei scurtcircuitate; b) diferenţa de potenţial de pe armăturile ei care nu sînt scurtcircuitate?

S o l u ţ i e. Atît densitatea de sarcină care apare sub acţiunea unei întinderi uniaxiale pe armăturile scurtcircuitate, cît şi diferenţa de potenţial care apare sub acţiunea acestei întinderi pe armăturile nescurtcircuitate sînt proporţionale cu funcţia

$$M(\boldsymbol{q}) = B_{kl}\, q_k\, q_l = \mathbf{B} : \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}, \qquad (84.22)$$

unde $\boldsymbol{q}$ este vectorul unitar al direcţiei de întindere. Pentru densitatea de sarcină tensorul $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{n}\cdot\mathbf{d}$, iar pentru diferenţa de potenţial $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{n}\cdot\mathbf{d}/(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\varkappa}\cdot\boldsymbol{n})$; aici $\mathbf{d}$ este tensorul coeficienţilor pie-

zoelectrici, iar $\varkappa$, tensorul permitivității dielectrice. Problema se reduce la găsirea vectorilor $\boldsymbol{q}$ care satisfac condițiile

$$\Phi_1(\boldsymbol{q}) = \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{q} - 1 = 0, \quad \Phi_2(\boldsymbol{q}) = \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{q} = 0, \tag{84.23}$$

pentru care funcția $M(\boldsymbol{q})$ atinge valoarea extremă. Pentru aceasta se construiește funcția ajutătoare

$$F = \frac{1}{2} M - \frac{1}{2} \lambda \Phi_1 + \mu \Phi_2$$

cu multiplicatorii λ și μ nedeterminați și se rezolvă sistemul format din ecuațiile (84.23) și din

$$\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{q}} = \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{q} - \lambda \boldsymbol{q} + \mu \boldsymbol{n}, \quad \frac{\partial F}{\partial q_k} = B_{kl} q_l - \lambda q_k + \mu n_k. \tag{84.24}$$

O asemenea problemă a fost analizată amănunțit în § 37 — v. relațiile (37.7) și în continuare. Acolo s-a arătat că tensorii și vectorii care figurează în problemă este convenabil să fie raportați la un sistem de coordonate a cărui axă X_3 este orientată după vectorul $\boldsymbol{n}$. Efectuînd aceasta, găsim valorile extreme ale funcției $M = \mathbf{B} : \boldsymbol{qq}$

$$\lambda_{(1,2)} = \frac{1}{2} [(B_{11} + B_{22}) \pm \sqrt{(B_{11} - B_{22})^2 + (2B_{12})^2}] \tag{84.25}$$

și sistemul de ecuații pentru determinarea componentelor $q_1^{(s)}$ și $q_2^{(s)}$ $(s = 1, 2)$

$$\begin{aligned} (B_{11} - \lambda_{(s)}) q_1^{(s)} + B_{12} q_2^{(s)} &= 0, \\ B_{12} q_1^{(s)} + (B_{22} - \lambda_{(s)}) q_2^{(s)} &= 0, \end{aligned} \tag{84.26}$$

componenta $q_3^{(s)}$ fiind egală cu zero.

În general, problemele de extremum ale fizicii cristalelor, după cum se vede chiar și din puținele exemple date aici, sînt destul de variate și chiar destul de complicate. Ele se aseamănă, se pare, nu numai prin caracterul comun al problemei, ci și prin metoda generală de rezolvare — metoda multiplicatorilor Lagrange nedeterminați. Problema 1c, care a fost rezolvată prin alt procedeu, nu contrazice, ci mai degrabă confirmă această con-

cluzie : pentru ca tocmai de aceea s-a şi reuşit rezolvarea fără a apela la metoda multiplicatorilor nedeterminaţi, deoarece simetria proprietăţilor piezoelectrice ale mediului este definită nu printr-un grup cristalografic, ci prin grupul limită.

§ 85. PROBLEMA COMPARĂRII PROPRIETĂŢILOR TENSORIALE ALE CRISTALELOR

Fiind vorba despre proprietăţile scalare ale unui cristal — cum ar fi densitatea şi căldura specifică — nu constituie nici o dificultate să se stabilească dacă aceste proprietăţi coincid sau sînt apropiate ca mărime pentru două substanţe diferite. Dacă trecem la examinarea proprietăţilor vectoriale — să zicem a coeficienţilor piroelectrici — deja se poate vorbi despre problema comparării acestor proprietăţi, cu toate că şi în cazul dat ea se rezolvă foarte uşor : evident, proprietăţile piroelectrice ale două cristale sînt asemănătoare dacă coincide suma pătratelor coeficienţilor piroelectrici

$$p_i^{(1)} p_i^{(1)} = p_j^{(2)} p_j^{(2)}. \tag{85.1}$$

Aceste proprietăţi sînt apropiate dacă expresiile (85.1), nefiind egale, se deosebesc suficient de puţin una de alta. Astfel, turmalina, cristal din clasa $3m$, al cărei vector al coeficienţilor piroelectrici, $\boldsymbol{p}^{(1)} = 1{,}2\boldsymbol{e}_3$ (în unităţi CGSE), după proprietăţile sale piroelectrice s-ar apropia foarte mult de cristalul ipotetic din clasa 1, cu vectorul coeficienţilor piroelectrici $\boldsymbol{p}^{(2)} = 0{,}4\boldsymbol{e}_1 + 0{,}8\boldsymbol{e}_2 + 0{,}8\boldsymbol{e}_3$ (în aceleaşi unităţi).

Problema comparării proprietăţilor este încă şi mai simplă, dacă proprietatea care ne interesează este descrisă de un tensor simetric de rangul doi : pentru coincidenţa unor astfel de proprietăţi este necesar şi suficient să coincidă valorile proprii ale tensorilor de material care sînt comparaţi.

Să studiem problema comparării unei proprietăţi tensoriale arbitrare, în cazul a două cristale care aparţin aceleiaşi clase. Mai exact, vom presupune că forma tensorului de material corespunzător este aceeaşi pentru toate cristalele.

Aici trebuie să deosebim două cazuri. Dacă tensorul dat are tot atîţia invarianţi independenţi cîte componente independente sînt, condiţia necesară şi suficientă de coincidenţă a proprietăţilor este egalitatea tuturor componentelor tensorului de material al unuia dintre cristale cu componentele de aceiaşi indici ale tensorului de material al celuilalt cristal

$$A_{i\ldots k}^{(1)} = A_{i\ldots k}^{(2)}.$$

Dacă însă pentru tensorul de material dat, numărul de componente independente şi numărul de invarianţi independenţi nu concid, problema se complică substanţial. Aşa cum s-a explicat în § 47, un tensor, ca obiect geometric, este definit prin invarianţii săi. Dacă numărul de componente independente este mai mare decît numărul de invarianţi, aceasta înseamnă că simetria cristalului admite o rotaţie a tensorului de material de tipul dat, ca corp solid, faţă de structura cristalină (şi faţă de sistemul de coordonate cristalofizic, legat de structura cristalină). În acest caz, se poate întîmpla ca coincidenţa componentelor a doi tensori de material faţă de sistemul de coordonate cristalofizic să nu fie determinat de o diferenţă între aceşti tensori, ca obiecte geometrice, ci, pur şi simplu, de faptul că ei sînt orientaţi diferit faţă de sistemul de coordonate cristalofizic. Rezultă deci că înainte de a-i compara, astfel de tensori trebuie să fie orientaţi în acelaşi fel; dacă tensorii de material sînt orientaţi la fel, atunci, în cazul coincidenţei unei anumite proprietăţi, toate componentele unui tensor vor fi tot egale cu componentele cu aceiaşi indici ale celuilalt tensor. Problema comparării proprietăţilor tensoriale s-a redus la realizarea unei aceleiaşi orientări a celor doi tensori de material. În fiecare caz concret nu este greu să ne dăm seama cum trebuie procedat. Vom examina două exemple.

Se compară proprietăţile piezoelectrice a două cristale din clasa m. Tensorul coeficienţilor piezoelectrici, $\mathbf{d}$, pentru această clasă, are 10 componente independente, pe cînd invarianţi independenţi are numai 9; componenta „suplimentară" caracterizează rotaţia tensorului în planul de simetrie $m \perp X_2$. Să analizăm vectorul $\boldsymbol{d} = \mathbf{d} : \mathbf{I}$, cu componentele $d_i = d_{ikk}$, care caracterizează efectul piezoelectric sub acţiunea unei comprimări hidrostatice. În această clasă, el are forma (v. tabelul 58.2)

$$\boldsymbol{d} = (d_{11} + d_{12} + d_{13})\, \boldsymbol{e}_1 + (d_{31} + d_{32} + d_{33})\boldsymbol{e}_3 = d_1\boldsymbol{e}_1 + d_3\boldsymbol{e}_3. \tag{85.2}$$

Vom denumi sistem propriu de coordonate, $X_1'X_2X_3'$, al tensorului $\mathbf{d}$, acel sistem care are axa X_1' orientată după vectorul $\boldsymbol{d}$; unghiul de rotaţie a lui faţă de sistemul cristalofizic $X_1X_2X_3$ se determină din ecuaţia

$$d_{3'} = d_1 \sin\varphi + d_3 \cos\varphi = 0 \tag{85.3}$$

cu condiţia suplimentară

$$d_{1'} = d_1 \cos\varphi - d_3 \sin\varphi > 0. \tag{85.4}$$

Raportînd fiecare tensor la sistemul lui propriu, se pot compara componentele tensorilor.

Este cazul să subliniem că sistemul propriu de coordonate poate fi introdus şi prin alte procedee (de exemplu, se poate considera drept sistem propriu sistemul $X_1''X_2X_3''$, determinat prin condiţiile $d''_{322} = 0$, $d''_{122} > 0$); orice sistem propriu definit în mod convenabil este util pentru compararea tensorilor de material.

Urmîndu-l pe Novojilov (1958, cap. V, §§ 19, 20), vom mai studia şi problema comparării proprietăţilor elastice ale cristalelor sistemului triclinic. Tensorul coeficienţilor deformabilităţii elastice, **s**, are 21 de componente independente şi numai 18 invarianţi independenţi. Drept sistem de coordonate propriu al său poate fi luat, de pildă, sistemul construit pe vectorii proprii ai componentelor tensorului de rangul doi, $\mathbf{S} = \mathbf{s} : \mathbf{I}$ (componentele lui sînt $S_{ij} = s_{ijkk}$). Pentru compararea componentelor tensorilor deformabilităţii elastice ai diferitelor cristale, trebuie mai întîi raportat fiecare tensor la sistemul lui propriu de coordonate. În acest caz, sistemul propriu se poate lua, de asemenea, într-un alt mod, de exemplu, construindu-l pe vectorii proprii ai tensorului simetric de rangul doi, **Z**, de componente $Z_{ij} = z_{ikjk}$ (v. tabelele 53.1 şi 54.1).

Să trecem la problema comparării proprietăţilor tensoriale ale cristalelor din diverse clase, cînd forma tensorilor comparaţi este diferită; ne vom mărgini la un caz particular important pentru fizica cristalelor, cazul în care una dintre clase este subgrup al celeilalte clase.

Să apelăm, de la bun început, la exemple. Să zicem că trebuie să comparăm proprietăţile elastice ale modificaţiilor cubică şi tetragonală ale unui cristal de titanat de bariu. Aceste modificaţii se deosebesc una de alta numai prin mici deplasări ale atomilor (v. § 64) şi, comparînd proprietăţile lor elastice, este firesc să impunem condiţia ca sistemele de coordonate din ambele modificaţii să fie orientate la fel faţă de structură. În cazul de faţă, celula elementară a modificaţiei tetragonale se deosebeşte de o celulă a modificaţiei cubice numai printr-o mică deformaţie în direcţia axei tetragonale. Din această cauză, sistemele de coordonate cristalofizice, standard, au aceeaşi orientare faţă de structură, astfel încît se pot compara direct valorile tabelate ale componentelor tensorilor deformabilităţii elastice ale ambelor modificaţii de titanat de bariu.

Cristalul de trioxid de wolfram, WO_3, prezintă, de asemenea, cele două modificaţii cubică şi tetragonală, una dintre ele obţinîndu-se din cealaltă tot numai printr-o deplasare mică a atomilor, însă în acest caz celula elementară a modificaţiei tetragonale se deosebeşte esenţial de celula modificaţiei cubice: una dintre

muchiile ei concide cu o muchie a celulei cubice, pe cînd celelalte două — cu diagonalele fețelor celulei cubice. Din această cauză, sistemele cristalofizice ale ambelor modificații sînt orientate diferit față de structură; pentru a obține ca cele două sisteme să fie orientate la fel față de structură, trebuie ca unul dintre sistemele de coordonate cristalofizice, de pildă, cel tetragonal, să fie rotit cu 45° în jurul axei tetragonale. Cu toate că în sistemul de coordonate rotit, tensorul coeficienților deformabilității elastice va avea aceeași formă ca și sistemul de coordonate cristalofizic inițial, componentele lui se modifică; după cum se poate deduce ușor, componentele tensorului „rotit" se exprimă prin componentele tensorului inițial în felul următor

$$\begin{bmatrix} s_{11}-a/2 & s_{12}+a/2 & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & s_{11}-a/2 & s_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & s_{44} & 0 & 0 \\ & & & & s_{44} & 0 \\ & & & & & s_{66}+2a \end{bmatrix}, \qquad (85.5)$$

unde $a = s_{11} - s_{12} - s_{66}/2$. Tocmai combinațiile liniare din acest tablou, nicidecum coeficienții cristalofizici ai deformabilității elastice ai modificației tetragonale a trioxidului de wolfram, trebuie comparați cu coeficienții de aceiași indici ai tensorului deformabilității elastice ai modificației sale cubice.

O situație analoagă apare în cazul comparării proprietăților piezoelectrice și elastice ale celor două modificații cristaline de sulfură de zinc, ZnS — sfaleritul (clasa $\bar{4}3m$) și wurtzitul (clasa $6mm$). Pentru a putea compara direct coeficienții piezoelectrici și coeficienții deformabilității elastice ai ambelor modificații, vom reprezenta tensorii de material ai modificației cubice, într-un sistem de coordonate în care axa X_3 este orientată după axa de ordinul trei, iar X_1 după normala la unul dintre planurile de simetrie care trec prin ea *. Tensorul deformabilității elastice capătă,

* Prin urmare, noi comparăm o clasă $\bar{4}3m$ nu cu clasa $6mm$, la care se referă wurtzitul, ci cu clasa $3m$, deoarece $3m$, spre deosebire de $6mm$, este într-adevăr un subgrup al grupului $\bar{4}3m$. Mai departe, în general, s-ar putea ca și tensorii modificației hexagonale să fie scriși în sistemul cristalofizic al clasei $3m$, însă putem să nu facem aceasta, deoarece tensorii respectivi satisfac condițiile teoremei lui Hermann.

în acest caz, forma

$$\begin{bmatrix} s_{11}-a/2 & s_{12}+a/6 & s_{13}+a/3 & a\sqrt{2/3} & 0 & 0 \\ & s_{11}-a/2 & s_{13}+a/3 & -a\sqrt{2/3} & 0 & 0 \\ & & s_{11}-2a/3 & 0 & 0 & 0 \\ & & & s_{44}+4a/3 & 0 & 0 \\ & & & & s_{44}+4a/3 & 2a\sqrt{2}/3 \\ & & & & & s_{44}+2a/3 \end{bmatrix} \quad (85.6)$$

unde $a = s_{11} - s_{12} - s_{44}/2$, iar tensorul coeficienților piezoelectrici forma

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -d/\sqrt{3} & 2d/\sqrt{6} \\ d/\sqrt{6} & -d/\sqrt{6} & 0 & -d/\sqrt{3} & 0 & 0 \\ -d/2\sqrt{3} & -d/2\sqrt{3} & d/\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (85.7)$$

unde $d = d_{14}$. Numai scriind tensorul coeficienților deformabilității elastice a sfaleritului în forma (85.6), iar tensorul coeficienților lui piezoelectrici în forma (85.7) are sens să se compare acești tensori cu tensorii de material corespunzători ai wurtzitului.

Ultimul exemplu : compararea proprietăților dielectrice, piezoelectrice și elastice ale celor două modificații cristaline pentru dihidrofosfatul de potasiu — tetragonal (clasa $\bar{4}2m$) și rombic (clasa $mm2$). Din regula de alegere a sistemelor de coordonate cristalofizice (v. anexa A), rezultă clar că pentru a se putea compara proprietățile tensoriale ale acestor două modificații, tensorii uneia dintre ele trebuie raportați la un sistem de coordonate rotit față de sistemul cristalofizic cu 45° în jurul axei X_3. Tranziția de fază care leagă cele două modificații între ele a fost studiată în § 65 (v., de asemenea, tabelele 64.1 și 65.1); pentru această problemă este mai convenabil să raportăm tensorii de material ai modificației tetragonale la sistemul de coordonate cristalofizic, iar tensorii de material ai modificației rombice la sistemul rotit.

Aceştia din urmă vor căpăta acum forma

$$[\varkappa_{i'j'}] = \begin{bmatrix} \frac{\varkappa_{11} + \varkappa_{22}}{2} & \frac{\mp\varkappa_{11} \pm \varkappa_{22}}{2} & 0 \\ & \frac{\varkappa_{11} + \varkappa_{22}}{2} & 0 \\ & & \varkappa_{33} \end{bmatrix}, \tag{85.8}$$

$$[d_{i'\lambda'}] = \\ = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{\pm d_{24} \mp d_{15}}{2} & \frac{d_{24} + d_{15}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{d_{24} + d_{15}}{2} & \frac{\pm d_{24} \pm d_{15}}{2} & 0 \\ \frac{d_{31} + d_{32}}{2} & \frac{d_{31} + d_{32}}{2} & d_{33} & 0 & 0 & \pm d_{32} \mp d_{31} \end{bmatrix}, \tag{85.9}$$

$$[s_{\lambda'\mu'}] = \\ = \begin{bmatrix} \frac{s_{11} + s_{12} - a}{2} & \frac{2s_{12} + a}{2} & \frac{s_{13} + s_{23}}{2} & 0 & 0 & \frac{\mp s_{11} \pm s_{32}}{2} \\ & \frac{s_{11} + s_{12} - a}{2} & \frac{s_{13} + s_{23}}{2} & 0 & 0 & \frac{\mp s_{11} \pm s_{22}}{2} \\ & & s_{33} & 0 & 0 & \frac{\mp s_{13} \pm s_{23}}{2} \\ & & & \frac{s_{44} + s_{55}}{2} & \frac{\pm s_{44} \mp s_{55}}{2} & 0 \\ & & & & s_{44} + s_{55} & 0 \\ & & & & & s_{66} + 2a \end{bmatrix}, \tag{85.10}$$

unde $a = 1/2(s_{11} + s_{22} - 2s_{12} - s_{66})$.

Combinaţiile componentelor tabelate (cristalofizice) ale tensorilor de material ai modificaţiei rombice a dihidrofosfatului de potasiu se pot compara cu valorile lor tabelate pentru modificaţia tetragonală a acestei substanţe. Tocmai aceasta s-a realizat

în tabelul 65.1. Nedeterminarea semnului în cazul unor componente apare pentru că planurile de simetrie care sînt echivalente în clasa $\bar{4}2m$ devin neechivalente în clasa $mm2$ și deocamdată nu știm la care dintre planurile de simetrie este perpendiculară axa X_1 a modificației rombice și la care dintre ele axa X_2; pentru a stabili aceasta, trebuie măsurați, sau, cel puțin, comparați între ei parametrii celulei elementare ai modificației rombice.

În acest paragraf problema comparării proprietăților tensoriale ale cristalelor a fost expusă pe exemplul proprietăților dielectrice, piezoelectrice și elastice. Celelalte proprietăți tensoriale ale cristalelor pot fi comparate utilizînd aceleași metode.

§ 86. PROBLEMA ALEGERII SISTEMELOR DE COORDONATE CRISTALOGRAFICE ȘI CRISTALOFIZICE STANDARD

Să ne imaginăm o situație obișnuită în zilele noastre : în două laboratoare diferite este sintetizat, independent, un același cristal și se studiază proprietățile lui. Pentru a-l descrie la fel, cercetătorii ambelor laboratoare trebuie să aleagă în același mod sistemele de coordonate cristalografice și cristalofizice, pentru aceasta fiind însă necesare reguli de alegere a sistemului de coordonate general acceptate, care să fie exact aceleași.

Aici sînt expuse indicațiile existente pentru alegerea sistemelor și se analizează posibilitățile precizării lor. Este vorba despre faptul că pentru alegerea, în fiecare singonie, a axelor de coordonate cristalografice, X, Y, Z, există reguli unanim acceptate (v. § 4).Au căpătat, de asemenea, largă răspîndire regulile care permit să se facă legătura dintre axele cristalofizice, X_1, X_2, X_3, și axele cristalografice, X, Y, Z. Aceste reguli sînt următoarele : cînd un sistem cristalografic de coordonate este rectangular, axele X_1, X_2, X_3 coincid, respectiv, cu axele X, Y, Z; în cristalele singoniei hexagonale axele X_3 și X_1 coincid, respectiv, cu axele Z și X; în cristalele singoniei monoclinice axele X_2 și X_3 coincid, respectiv, cu axele Y și Z; în fine, în cristalele singoniei triclinice axa X_3 coincide cu axa Z, iar axa X_1 se află în planul (010), adică în planul XZ. Aceste reguli sînt reunite în tabelul A.2, în concordanță cu ele fiind întocmite și tabelele A.1 și B.1. Formularea acestor reguli este dată în *IRE Standards on Piezoelectric Crystals* (1949) ; v. și Mason (1952). Mai trebuie însă alese sensurile pozitive pe axe și decis care dintre axele simetric echivalente se numesc, să zicem, X și care Y. Datele structurale sînt insuficiente pentru acest lucru ; sîntem nevoiți să utilizăm rezultatele unor determinări cristalofizice. Recomandările corespunzătoare sînt conținute

în *IRE Standards* (1949). Din nefericire, aceste recomandări se referă la cristalele piezoelectrice. În plus, pentru ca aceste cristale să poată fi utilizate în cazul unui cristal enantiomorf dat, trebuie știut dacă cristalul este dextrogir sau levogir; dar care anume cristale trebuie denumite dextrogire și care levogire nu este indicat în aceste standarde (cu excepția cristalului de cuarț, căruia îi este consacrat un punct separat).

Aici sînt formulate reguli de alegere a sistemelor de coordonate valabile pentru toate clasele cristalografice; în limita posibilităților ele concordă cu recomandările *IRE*. În afară de aceasta, aici sînt propuse regulile generale pentru a decide care dintre două modificații enantiomorfe este cea dextrogiră. Vom examina aceste reguli, luînd, mai întîi ca exemplu singonia tetragonală.

Dacă într-un cristal oarecare cu singonie tetragonală se ia, conform regulilor generale (v. § 4), un sistem de coordonate *A* (fig. 86.1), atunci și sistemele *B*, *C*, . . ., *H*, legate de sistemul *A* prin operațiile de simetrie ale clasei 222, satisfac, de asemenea, regulile de alegere a axelor de coordonate cristalografice; aceste reguli permit distingerea între un sistem și altul. În clasele $4/mmm$ și 422 toate aceste sisteme sînt simetric echivalente, astfel încît deosebirea lor nici nu este posibilă și nici necesară. În celelalte opt clase, aceste sisteme sînt însă grupate în seturi de sisteme simetric echivalente, după cum se vede din următorul tabel:

Clasele	Transformarea de prima speță	Seturile de sisteme echivalente
$4mm$, $4/m$, 4	1, 2_z, 4_z, 4_z^3	{*A*, *B*, *C*, *D*}; {*E*, *F*, *G*, *H*}
$\bar{4}2m$	1, 2_z, 2_x, 2_y	{*A*, *B*, *E*, *F*}; {*C*, *D*, *G*, *H*}
$\bar{4}$	1, 2_z	{*A*, *B*}; {*C*, *D*}; {*E*, *F*}; {*G*, *H*}

Notațiile transformărilor și ale sistemelor de coordonate sînt aici aceleași cu cele din figura 86.1; sistemele de coordonate care fac parte dintr-un set sînt cuprinse în acolade. Sistemele care fac parte din seturi diferite sînt simetric neechivalente și pot (și trebuie) să fie deosebite unul de altul.

În clasele $4mm$ și $\bar{4}2m$, pentru alegerea unuia dintre cele două seturi de sisteme de coordonate, posibile în cristalele acestor clase, se utilizează recomandările *IRE*: în clasa $4mm$ vom alege acel set față de care este pozitiv coeficientul piezoelectric d_{33}, în clasa $\bar{4}2m$ pe acela față de care este pozitiv coeficientul d_{36}.

Clasa $4/m$ are centru de simetrie, nu posedă proprietăți piezoelectrice și de aceea în *IRE Standards* (1949) nu este luată în considerație. În această clasă sistemele de coordonate permise sînt

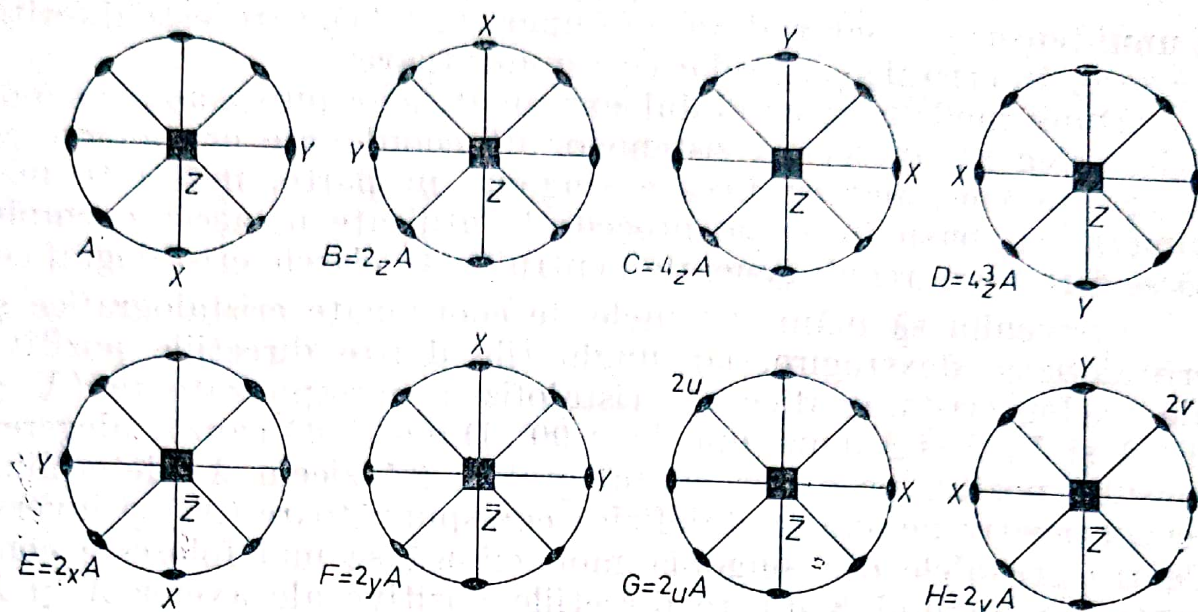


Fig. 86.1. Schema alegerii denumirilor și a sensurilor pozitive ale direcțiilor axelor de coordonate în cristalele singoniei tetragonale.

însă grupate în cele două seturi (v. tabelul); vom conveni să îl alegem pe acela dintre ele, față de care coeficientul deformabilității elastice, s_{16}, este pozitiv (se poate verifica ușor că operațiile de simetrie care transformă un set în altul modifică semnul acestui coeficient; astfel, $2_x s_{16} = -s_{16}$).

Aceeași regulă poate fi aplicată și pentru alegerea unuia dintre cele două seturi posibile din clasa 4 cît și a unei perechi de seturi dintre cele două perechi analoage, posibile în clasa $\bar{4}$. Pentru a alege un set dintre cele două, care formează această pereche, vom cere suplimentar ca coeficientul d_{36} să fie pozitiv. Menționăm că grupul $\bar{4}$ este unicul subgrup comun grupurilor $4/m$ și $\bar{4}2m$, fiind deci normal ca pentru clasa $\bar{4}$ să unificăm regulile aplicate atît clasei $4/m$ cît și clasei $\bar{4}2m$; aceasta s-a și făcut aici.

A rămas să mai indicăm regulile care permit să denumim una dintre modificațiile enantiomorfe ale claselor 422 și 4, modificație dextrogiră. Vom conveni să denumim modificație dextrogiră pe aceea dintre modificațiile clasei 422 pentru care este pozitiv coeficientul piezoelectric, d_{14}, cît și pe aceea dintre modificațiile clasei 4 pentru care este pozitiv coeficientul d_{33}. Coeficienții sînt definiți față de setul sistemelor de coordonate simetric echivalente drepte, pentru clasa dată; în acest caz este important ca alegerea setului din clasa 4 să se facă în raport cu o proprietate care are centru de simetrie (elasticitatea), care se manifestă absolut identic în ambele modificații enantiomorfe. În general, pentru definirea modificației dextrogire s-ar fi putut utiliza oricare dintre coeficienții piezoelectrici și, mai mult decît atît, oricare componentă

a unui tensor de material de tip impar (v. § 44), care este diferită de zero, în cristalele claselor corespunzătoare.

După modelul exemplului examinat, s-ar putea analiza modelele alegerii univoce a sistemelor de coordonate cristalografice şi cristalofizice pentru fiecare singonie în parte, însă este mai nimerit ca, bazîndu-ne pe procedeele utilizate în acest exemplu să se formuleze reguli generale pentru toate clasele cristalografice.

Convenim să luăm sistemele de coordonate cristalografice şi cristalofizice dextrogire, iar unghiurile dintre direcţiile pozitive ale axelor cristalografice şi cristalofizice corespunzătoare (X şi X_1, Y şi X_2, Z şi X_3) mai mic decît 90°. Din această cauză, alegerea sensului pozitiv pe o axă cristalografică (să zicem X) determină sensul pozitiv pe axa cristalofizică corespunzătoare (X_3) şi invers. Pentru cristalele din singonia monoclinică se mai foloseşte convenţia ca unghiul β dintre direcţiile pozitive ale axelor X şi Z să fie obtuz, pentru singonia triclinică fiind necesar ca pe lîngă β să fie obtuz şi unghiul α, dintre direcţiile pozitive ale axelor Y şi Z. Aceste inegalităţi, împreună cu condiţia ca sistemul de coordonate să fie dextrogir, definesc sensurile pozitive pe axele cristalografice ale singoniilor triclinică şi monoclinică.

Regulile de alegere a axelor cristalografice şi a sensurilor pozitive de pe acestea definesc nu un singur sistem de axe de coordonate, ci $n/2$ sisteme, rotite unul faţă de altul (n este ordinul grupului de simetrie a clasei holoedrice a singoniei date), care sînt legate între ele prin transformări de speţa întîi, ce fac parte din grupul de simetrie al clasei holoedrice, sau, ceea ce este acelaşi lucru, toate transformările de simetrie ale clasei enantiomorfe hemiedrice (v. tabelul 86.1). Toate aceste sisteme sînt simetric echivalente în cristalele claselor holoedrică şi hemiedrică enantiomorfă, astfel încît nici nu se pune problema alegerii sensurilor pozitive pe axe, sau denumirea axelor pentru cristalele acestor clase. Faţă de operaţiile de simetrie ale celorlalte clase, cele $n/2$ sisteme de coordonate vor reprezenta două sau patru seturi de sisteme simetric echivalente (cu cîte $n/4$ sau $n/8$ sisteme în fiecare). Numărul acestor seturi pentru fiecare clasă este dat în tabelul 86.1. Sistemele unui set sînt legate de sistemele celorlalte seturi prin transformările de simetrie ale clasei hemiedrice enantiomorfe, de aceeaşi singonie, care nu fac parte din grupul clasei date.

Alegerea sensurilor pozitive pe axele de coordonate sau denumirea axelor se reduc la alegerea unuia dintre cele două sau patru seturi posibile. În acest caz trebuie să ne ghidăm după criteriile cristalofizice (întrucît cele cristalografice au fost deja epuizate) şi să utilizăm seturile formate din sistemele cristalofizice, obţinute din cele cristalografice, conform regulilor convenite. Sistemele de

Tabelul 86.1

Metodele de alegere a sistemelor de coordonate și a modificațiilor dextrogire în cele 32 de clase cristalografice

Singonii și sisteme		Clasele cristalografice: holoedrice	hemiedrice: enantiomorfe	hemiedrice: hemimorfe	hemiedrice: paramorfe	tetartoedrice: enantiomorfe	tetartoedrice: hemimorfe	tetartoedrice: paramorfe	octoedrice: enantiomorfe
Triclinică		{ $\bar{1}$	1 }						
Monoclinică		{ $2/m$	2	m }					
Rombică		{ mmm	222	$mm2$ }					
Tetragonală		{ $4/mmm$	422	$4mm$, $\bar{4}2m$ }	{ $4/m$	4	$\bar{4}$		
Hexagonală	hexagonală	{ $6/mmm$	622	$6mm$, $\bar{6}m2$ }	{ $6/m$	6	$\bar{6}$ }		
	trigonală				{ $\bar{3}m$	32	$3m$ }	{ $\bar{3}$	3 }
Cubică		{ $m3m$	432	$\bar{4}3m$ }	{ $m3$	23 }			
Numărul de seturi		1	1	2	2	2	4	4	4
Alegerea sistemului de coordonate		—	—	1 impară	1 pară	1 pară	1 pară 1 impară	2 pare	2 pare
Alegerea modificației dextrogire		—	1 impară	—	—	1 impară	—	—	1 impară

Observații. Între acolade sînt cuprinse clasele care fac parte dintr-un același subsistem: în stînga — subsistemul superior al sistemului dat, în dreapta — cel inferior. „Numărul de seturi" arată cîte seturi diferite ale sistemelor de coordonate și metric echivalente, care satisfac toate condițiile cristalografice impuse, au cristalele din clasele considerate. În rîndurile „Alegerea sistemului de coordonate" și „Alegerea modificației dextrogire" sînt indicate semnele numărului de componente ale tensorilor de material și de care tip anume — par sau impar — care trebuie determinate pentru alegerea sistemului de coordonate și a modificației dextrogire.

coordonate cristalofizice, care intră în unul dintre seturi, sînt simetric echivalente, pe cînd cele care fac parte din seturi diferite sînt neechivalente. Din această cauză, orice tensor de material al unui cristal, în toate sistemele ce fac parte din acelaşi set, are aceleaşi componente, iar în sistemele care aparţin unor seturi diferite unii dintre tensorii de material pot avea componente diferite, chiar dacă acest fapt nu este obligatoriu. În principiu, totdeauna se poate găsi un tensor de material la care cel puţin una dintre componente să-şi schimbe semnul prin trecerea de la un set la altul; în clasa în care aceste seturi se contopesc în unul singur, acea componentă se va anula. Alegerea unuia dintre cele două seturi va fi complet determinată dacă vom conveni să folosim pentru fiecare cristal dat acel set faţă de care această componentă este pozitivă.

Cristalele claselor paramorfe, adică ale acelor clase cu centru de simetrie care nu sînt holoedrice, au numai proprietăţi cu centru de simetrie; de aceea, pentru alegerea setului, trebuie folosiţi tensori de tip par, care au, în clasa paramorfă dată, un număr de componente mai mare decît în clasa holoedrică corespunzătoare (dacă clasa considerată este tetartoedrică, au mai multe decît în clasa hemiedrică paramorfă). În sistemele trigonal şi tetragonal această condiţie este satisfăcută deja de tensorii elastici, însă pentru sistemele hexagonal şi cubic trebuie recurs la tensorii piezooptici.

Regulile de alegere, admise pentru clasa paramorfă, este firesc să fie extinse asupra întregului subsistem (v. § 44) din care acesta face parte. În acest caz se dovedeşte că alegerea sistemului de coordonate nu numai pentru clasele paramorfe, ci şi pentru cele enantiomorfe (tetartoedrice şi octoedrice) este determinată de tensorii de tip par (utilizarea tensorilor care nu au centru de simetrie deosebeşte substanţial aceste recomandări de *IRE Standards* — 1949 — în care se utilizează numai tensori de tip impar, şi anume, tensori piezoelectrici).

În clasele hemimorfice, pentru alegerea unui set este necesară o componentă a unui tensor de material de tip impar; vom conveni să utilizăm în acest scop primul coeficient piezoelectric diferit de zero din şirul

$$d_{33},\ d_{11},\ d_{22},\ d_{36},\ d_{14} \tag{86.1}$$

(cu coeficientul d_{31} în locul lui d_{14} acest şir se utilizează şi în *IRE Standards* (1949)). În acest caz, pentru alegerea unui set din clasa hemimorfă tetartoedrică trebuie utilizat acel coeficient, care, în clasa enantiomorfă tetartoedrică a aceleiaşi singonii, este egal cu zero.

Conform regulilor expuse, în cristalele dextrogire sau levogire ale oricărei clase enantiomorfe sistemul de coordonate se alege în acelaşi fel, deoarece la alegere se folosesc numai tensori cu centru de simetrie. Tensorii fără centru de simetrie pot fi utilizaţi după aceasta pentru determinarea modificaţiei dextrogire, deoarece componentele acestor tensori, în cazul modificaţiilor dextrogire şi levogire ale aceleiaşi substanţe, sînt egale în valoare absolută, fiind de semne contrare, faţă de sistemul de coordonate introdus. Convenim să numim dextrogire acele cristale la care primul coeficient piezoelectric diferit de zero din şirul (86.1) este pozitiv. În clasa 432, în care toţi coeficienţii piezoelectrici sînt nuli, vom numi modificaţie dextrogiră acea modificaţie în care este pozitiv coeficientul de giraţie (v. § 81).

În tabelul 86.1 este arătat care sînt clasele care se numesc holoedrice, care hemiedrice etc., cum sînt ele distribuite în subsisteme, cîte seturi şi componente au şi ce fel de tensori — de tip par sau de tip impar — sînt necesari pentru alegerea sistemului de coordonate şi pentru determinarea modificaţiei dextrogire. Regulile de alegere propriu-zise ale sistemelor de coordonate cristalografic şi cristalofizic standard, pentru cele 32 de clase, şi regulile de alegere a modificaţiei dextrogire în cele 11 clase enantiomorfe sînt cuprinse însă în tabelul A.2.

La sfîrşitul tabelului A.2 există rubrica „Modificări posibile", în care se arată cum se vor modifica regulile de alegere a axelor de coordonate şi a modificaţiilor enantiomorfe, dacă se ia o altă aranjare pentru cristalele tuturor claselor singoniei monoclinice $Z \parallel 2$, sau $Z \perp m$ şi clasa $\bar{6}m2$, care, în această aranjare ($Z \parallel \bar{6}$, $X \parallel 2$) este firesc să fie notată cu $\bar{6}2m$. Tocmai astfel sînt alese sistemele de coordonate cristalofizice în tratatele clasice (Voigt, 1928; Şubnikov, Flint şi Boki, 1940), în unele cazuri această alegere fiind de preferat.

Aici sînt analizate metodele generale, nu procedeele concrete de alegere a sistemelor standard de coordonate. Se pot dovedi mai convenabili pentru aplicaţiile practice nu acei coeficienţi piezoelectrici care au fost propuşi aici, ci alţii; mai mult decît atît, în locul tensorilor piezooptici se pot utiliza, să zicem, tensorii de electrostricţiune, iar în loc de tensorii piezoelectrici, tensorii electrooptici. Esenţa metodei nu se schimbă însă.

§ 87. RELAŢII FUNCŢIONALE ÎN FIZICA CRISTALELOR

Pînă acum am presupus că termenii liniari reprezintă mici corecţii la termenii principali, liniari. Odată cu mărirea intensităţii solicitărilor aplicate şi cu creşterea preciziei măsurătorilor, în

ecuaţiile de material din fizica cristalelor apare un număr tot mai mare de termeni pătratici, cubici cît şi alte corecţii. În loc să se studieze însă, de pildă, dezvoltarea

$$D_i = \varkappa^{(1)}_{ij} E_j + \varkappa^{(2)}_{ijk} E_j E_k + \varkappa^{(3)}_{ijkl} E_j E_k E_l + \varkappa^{(4)}_{ijklm} E_j E_k E_l E_m + \ldots \tag{87.1}$$

şi să se analizeze ce formă anume trebuie să aibă tensorii $\boldsymbol{\varkappa}^{(1)}$, $\boldsymbol{\varkappa}^{(2)}$, $\boldsymbol{\varkappa}^{(3)}$, $\boldsymbol{\varkappa}^{(4)}$, ... pentru o clasă de simetrie dată a cristalului se poate formula, de la bun început, problema mult mai generală: care sînt restricţiile ce trebuie impuse legăturii funcţionale dintre vectorul $\boldsymbol{D}$ şi vectorul $\boldsymbol{E}$, pentru ca această dependenţă să fie compatibilă cu simetria cristalului?

Complet analog, în locul analizei generalizărilor legii lui Hooke

$$\varepsilon_\lambda = s^{(1)}_{\lambda\mu} \sigma_\mu + s^{(2)}_{\lambda\mu\nu} \sigma_\mu \sigma_\nu + s^{(3)}_{\lambda\mu\nu\rho} \sigma_\mu \sigma_\nu \sigma_\rho + \ldots \tag{87.2}$$

se poate pune problema compatibilităţii generale cu simetria cristalului a formei dependenţei funcţionale a tensorului simetric de rangul doi, de un alt tensor de acelaşi tip.

Dependenţa liniară a unui vector de alt vector este determinată de tensorul general de rangul doi cu simetria internă V^2, pe cînd dependenţa liniară a unui tensor simetric de rangul doi de un altul, printr-un tensor cu simetria internă $[V^2]^2$. Cea mai generală formă a dependenţei funcţionale a unui vector faţă de alt vector, sau a unui tensor faţă de alt tensor, compatibilă cu simetria cristalului, reprezintă o generalizare tocmai a unei astfel de legături definite, în cazul liniar, de tensorii de material de tipul V^2 şi, respectiv, $[V^2]^2$. Dealtfel, cele mai importante legături pentru fizica cristalelor, dintre doi vectori precum şi dintre doi tensori, sînt determinate de tensorii de material simetrici, de tipul $[V^2]$ şi $[[V^2]^2]$. Într-adevăr, cel puţin pentru procesele izotermice şi pentru cele adiabatice, dependenţa liniară dintre vectorii intensitate şi inducţie ale cîmpului electric este definită printr-un tensor de material de tipul $[V^2]$, iar dintre tensorii tensiunilor şi deformărilor, de un tensor de material de tipul $[[V^2]]$. Demonstrarea faptului că aceşti tensori sînt simetrici se bazează pe existenţa unor potenţiale, adică a unor funcţii scalare, de argument vectorial, $\Phi(\boldsymbol{E})$, şi de argument tensorial, $\Phi(\boldsymbol{\sigma})$, care sînt astfel încît

$$\boldsymbol{D} = \frac{\partial \Phi(\boldsymbol{E})}{\partial \boldsymbol{E}}, \quad D_i = \frac{\partial \Phi(\boldsymbol{E})}{\partial E_i}; \tag{87.3}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\partial \Phi(\boldsymbol{\sigma})}{\partial \boldsymbol{\sigma}}, \quad \varepsilon_\lambda = \frac{\partial \Phi(\boldsymbol{\sigma})}{\partial \sigma_\lambda}. \tag{87.4}$$

Generalizînd relaţiile $\boldsymbol{D} = \boldsymbol{D}(\boldsymbol{E})$ şi $\varepsilon = \varepsilon(\sigma)$ pentru cazul dependenţelor neliniare, vom pleca de la formulele (87.3) şi (87.4). Funcţia vectorială de argument vectorial, care satisface formula (87.3) şi funcţia tensorială de argument tensorial, care satisface formula (87.4), se numesc *funcţii de potenţial*. Prin urmare, pentru a explica legile fizicii cristalelor care privesc efectele esenţial neliniare, trebuie cunoscute funcţiile vectoriale şi tensoriale generale şi cele de potenţial, compatibile cu simetria cristalelor. Şi anume, pentru a defini o funcţie vectorială sau tensorială de potenţial este suficient să fie dat potenţialul, adică o funcţie scalară de argument vectorial, sau tensorial: $\Phi(\boldsymbol{E})$ sau $\Phi(\sigma)$.

În tabelul 87.1 este dată forma funcţiilor scalare şi vectoriale de argument vectorial, compatibile cu simetria celor 32 clase cristalografice şi pentru cele 7 clase limită, iar în tabelul 87.2 forma funcţiilor scalare care au ca argument un tensor simetric de rangul doi. Metodele de determinare a acestor funcţii sînt complicate, astfel încît nu le vom examina aici (v. Smith, 1962; Sirotin, 1964 şi 1965; Pleşakov şi Sirotin, 1966). Vom analiza numai modul în care sînt întocmite tabelele şi care este informaţia ce se poate extrage din ele.

În tabelul 87.1 clasele limită cristalografice sînt grupate în serii. Fiecărei serii îi este atribuită denumirea clasei superioare care intră în ea. Toate clasele care fac parte din aceeaşi serie au invarianţii vectoriali principali de acelaşi fel — ei sînt enumeraţi în paranteze, după denumirea seriei. Aceşti invarianţi principali au rolul de argumente ale funcţiilor arbitrare, f, f_0, f_1, ... De exemplu, seria $mm2$ are invarianţii principali A_z, A_x^2 şi A_y^2.

Pentru clasa principală a seriei, oricare funcţie scalară de argument vectorial, care este invariantă la grupul său de simetrie, poate fi exprimată ca funcţie de invarianţii principali. Aceasta se scrie sub forma $\Phi = f$ şi înseamnă că, pentru clasa $mm2$ potenţialul vectorial general este

$$\Phi = f(A_z, A_x^2, A_y^2), \tag{87.5}$$

unde f este o funcţie arbitrară de argumentele sale. Astfel, oricare invariant vectorial al grupului $mm2$ poate fi reprezentat ca funcţie de invarianţii A_z, A_x^2, A_y^2.

Pentru celelalte clase ale seriei, invarianţii vectoriali nu se reduc la cei principali. De exemplu, pentru clasa 2, care face parte din seria $mm2$, acest invariant suplimentar este A_xA_y. El nu poate fi dedus din invarianţii principali (se poate arăta că el este egal cu rădăcina pătrată din produsul dintre invarianţii principali al doilea şi al treilea, însă acest lucru nu este adevărat: $\sqrt{A_x^2A_y^2} = |A_xA_y|$), pătratul lui fiind însă o funcţie de invarianţii

Potențialele vectoriale, $\Phi(A)$, și funcțiile vectoriale generale, $V(A)$, compatibile cu simetria cristalelor și texturilor

Seria 1, $f = f(A_x, A_y, A_z)$:

clasa 1: $\Phi = f$, $\boldsymbol{V} = f_1\boldsymbol{i} + f_2\boldsymbol{j} + f_3\boldsymbol{k}$.

Seria m, $f = f(A_x, A_y, A_z^2)$:

clasa m ($m \perp Z$): $\Phi = f$, $\boldsymbol{V} = f_1\boldsymbol{i} + f_2\boldsymbol{j} + A_z f_3 \boldsymbol{k}$.

Seria $mm2$, $f = f(A_z, A_x^2, A_y^2)$:

clasa $mm2$: $\Phi = f$, $\boldsymbol{V} = f_1\boldsymbol{k} + A_x f_2\boldsymbol{i} + A_y f_3\boldsymbol{j}$:

clasa 2 ($2 \parallel Z$): $\Phi = f_0 + A_x A_y f_1$, $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}(mm2) + A_y f_4\boldsymbol{i} + A_x f_5\boldsymbol{j} + A_x A_y f_6\boldsymbol{k}$.

Seria mmm, $f = f(A_x^2 + A_y^2 + A_z^2)$:

clasa mmm: $\Phi = f$, $\boldsymbol{V} = A_x f_1\boldsymbol{i} + A_y f_2\boldsymbol{j} + A_z f_3\boldsymbol{k}$;

clasa 222: $\Phi = f_0 + A_x A_y A_z f_1$, $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}(mmm) + A_y A_z f_4\boldsymbol{i} + A_z A_x f_5\boldsymbol{j} + A_x A_y f_6\boldsymbol{k}$;

clasa $2/m$ ($2 \parallel Z$): $\Phi = f_0 + A_x A_y f_1$, $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}(mmm) + A_y f_4\boldsymbol{i} + A_x f_5\boldsymbol{j} + A_x A_y A_z f_6\boldsymbol{k}$;

clasa $\bar{1}$: $\Phi = f_0 + A_y A_z f_1 + A_z A_x f_2 + A_x A_y f_3$, $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}(2/m) +$

$+ A_x f_7\boldsymbol{k} + A_y f_8\boldsymbol{k} + A_z f_9\boldsymbol{i} + A_z f_{10}\boldsymbol{j} + A_x A_y A_z f_{11}\boldsymbol{i} + A_x A_y A_z f_{12}\boldsymbol{j}$.

Seria $4mm$, $f = f(A_z, A_x^2 + A_y^2, A_x^2 A_y^2)$:

clasa $4mm$: $\Phi = f$, $\boldsymbol{V} = f_1\boldsymbol{k} + f_2(A_x\boldsymbol{i} + A_y\boldsymbol{j}) + A_x A_y f_3(A_y\boldsymbol{i} + A_x\boldsymbol{j})$;

clasa 4: $\Phi = f_0 + A_x A_y(A_x^2 - A_y^2) f_1$, $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}(4mm) +$

$+ f_4(A_y\boldsymbol{i} - A_x\boldsymbol{j}) + A_x A_y f_5(A_x\boldsymbol{i} - A_y\boldsymbol{j}) + A_x A_y(A_x^2 - A_y^2) f_6\boldsymbol{k}$.

Seria $4/mmm$, $f = f(A_z^2, A_x^2 + A_y^2, A_x^2 A_y^2)$:

clasa $4/mmm$: $\Phi = f$, $\boldsymbol{V} = A_z f_1\boldsymbol{k} + f_1(A_x\boldsymbol{i} + A_y\boldsymbol{j}) + A_x A_y f_3(A_y\boldsymbol{i} + A_x\boldsymbol{j})$;

clasa 422 : $\Phi = f_0 + A_xA_yA_z(A_x^2 - A_y^2)\, f_1,\ \boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}(4/mmm) +$

$$+ A_zf_4(A_y\boldsymbol{i} - A_x\boldsymbol{j}) + A_xA_y(A_x^2 - A_y^2)\, f_5\,\boldsymbol{k} + A_xA_yA_zf_6(A_x\boldsymbol{i} - A_y\boldsymbol{j})\,;$$

clasa $\bar{4}2m$: $\Phi = f_0 + A_xA_yA_z\, f_1,\ \boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\,(4/mmm) + A_xA_yf_4\boldsymbol{k} +$

$$+ A_zf_5\,(A_y\boldsymbol{i} + A_x\boldsymbol{j}) + A_xA_yA_z\, f_6\,(A_x\boldsymbol{i} + A_y\boldsymbol{j})\,;$$

clasa $4/m$: $\Phi = f_0 + A_xA_y(A_x^2 - A_y^2)\, f_1,\ \boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\,(4/mmm) +$

$$+ f_4(A_y\boldsymbol{i} - A_x\boldsymbol{j}) + A_x - A_y\, f_5(A_x\boldsymbol{i} - A_y\boldsymbol{j}) + A_xA_yA_z\,(A_x^2 - A_y^2)\, f_6\,\boldsymbol{k}\,;$$

clasa $\bar{4}$: $\Phi = \Phi\,(4/m) + A_xA_yA_z\, f_2 + A_z(A_x^2 - A_y^2)\, f_3,\ \boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\,(4/m) +$

$$+ (A_x^2 - A_y^2)\, f_7\boldsymbol{k} + A_xA_yf_8\boldsymbol{k} + A_z\, f_9(A_x\boldsymbol{i} - A_y\boldsymbol{j}) + A_zf_{10}\,(A_y\boldsymbol{i} + A_x\boldsymbol{j}) +$$

$$+ A_xA_yA_zf_{11}\,(A_x\boldsymbol{i} + A_y\boldsymbol{j}) + A_xA_yA_zf_{12}\,(A_y\boldsymbol{i} - A_x\boldsymbol{j}).$$

Seria $3m$, $f = f(A_z,\ A_x^2 + A_y^2,\ A_y^3 - 3A_x^2\, A_y)$:

clasa $3m\ (m \perp X)$: $\Phi = f,\ \boldsymbol{V} = f_1\,\boldsymbol{k} + f_2(A_x\boldsymbol{i} + A_y\boldsymbol{j}) +$

$$+ f_3\,(2A_xA_y\boldsymbol{i} + A_x^2\boldsymbol{j} - A_y^2\boldsymbol{j})\,;$$

clasa 3 : $\Phi = f_0 + (A_x^3 - 3A_xA_y^2)\, f_1,\ \boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\,(3m) + f_4\,(A_y\boldsymbol{i} - A_x\boldsymbol{j}) +$

$$+ f_5(A_x^2\,\boldsymbol{i} - A_y^2\boldsymbol{i} - 2A_xA_y\boldsymbol{j}) + (A_x^3 - 3A_xA_y^2)\, f_6\,\boldsymbol{k}.$$

Seria $\bar{6}2m$, $f = f(A_z^2,\ A_x^2 + A_y^2,\ A_x^3 - 3\, A_x\, A_y^2)$:

clasa $\bar{6}2m\ (2 \parallel X)$: $\Phi = f,\ \boldsymbol{V} = A_z\, f_1\boldsymbol{k} + f_2\,(A_x\boldsymbol{i} + A_y\,\boldsymbol{j}) +$

$$+ f_3(A_x^2\boldsymbol{i} - A_y^2\boldsymbol{i} - 2A_xA_y\boldsymbol{j})\,;$$

clasa 32 $(2 \parallel X)$: $\Phi = f_0 + A_z(A_y^3 - 3A_x^2A_y)\, f_1,\ \boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\,(\bar{6}2m) +$

$$+ A_z\, f_4(A_y\boldsymbol{i} - A_x\boldsymbol{j}) + A_zf_5\,(2A_x\, A_y\boldsymbol{i} + A_x^2\boldsymbol{j} - A_y^2\boldsymbol{j}) + (A_y^3 - 3\,A_x^2A_y)\, f_6\,\boldsymbol{k}\,;$$

clasa $\bar{6}$: $\Phi = f_0 + (A_y^3 - 3A_x^2A_y)f_1$, $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}(\bar{6}2m) + f_4(A_y\boldsymbol{i} - A_x\boldsymbol{j}) +$

$+ f_5(2A_xA_y\boldsymbol{i} + A_x^2\boldsymbol{j} - A_y^2\boldsymbol{j}) + A_z(A_y^3 - 3A_x^2A_y)f_6\boldsymbol{k}$.

Seria $6mm$, $f = f(A_z, A_x^2 + A_y^2, A_x^6 - 15A_x^4A_y^2 + 15A_x^2A_y^4 - A_y^6)$:

clasa $6mm$: $\Phi = f$, $\boldsymbol{V} = f_1\boldsymbol{k} + f_2(A_x\boldsymbol{i} + A_y\boldsymbol{j}) +$

$+ (A_x^3 - 3A_xA_y^2)f_3(A_x^2\boldsymbol{i} - A_y^2\boldsymbol{i} - 2A_xA_y\boldsymbol{j})$;

clasa 6: $\Phi = f_0 + (3A_x^5A_y - 10A_x^3A_y^3 + 3A_xA_y^5)f_1$, $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}(6mm) +$

$+ f_4(A_y\boldsymbol{i} - A_x\boldsymbol{j}) + (A_x^3 - 3A_xA_y^2)f_5(2A_xA_y\boldsymbol{i} + A_x^2\boldsymbol{j} - A_y^2\boldsymbol{j}) +$

$+ (3A_x^5A_y - 10A_x^3A_y^3 + 3A_xA_y^5)f_6\boldsymbol{k}$.

Seria $6/mmm$, $f = f(A_z^2, A_x^2 + A_y^2, A_x^6 - 15A_x^4A_y^2 + 15A_x^2A_y^4 - A_y^6)$:

clasa $6/mmm$: $\Phi = f$, $\boldsymbol{V} = A_zf_1\boldsymbol{k} + f_2(A_x\boldsymbol{i} + A_y\boldsymbol{j}) +$

$+ (A_x^3 - 3A_xA_y^2)f_3(A_x^2\boldsymbol{i} - A_y^2\boldsymbol{i} - 2A_xA_y\boldsymbol{j})$,

clasa $6/m$: $\Phi = f_0 + (3A_x^5A_y - 10A_x^3A_y^3 + 3A_xA_y^5)f_1$, $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}(6/mmm) +$

$+ f_4(A_y\boldsymbol{i} - A_x\boldsymbol{j}) + (A_x^3 - 3A_xA_y^2)f_5(2A_xA_y\boldsymbol{i} + A_x^2\boldsymbol{j} - A_y^2\boldsymbol{j}) +$

$+ A_z(3A_x^5A_y - 10A_x^3A_y^3 + 3A_xA_y^5)f_6\boldsymbol{k}$;

clasa 622: $\Phi = f_0 + A_z(3A_x^5A_y - 10A_x^3A_y^3 + 3A_xA_y^5)f_1$, $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}(6/mmm) +$

$+ A_zf_4(A_y\boldsymbol{i} - A_x\boldsymbol{j}) + A_z(A_x^3 - 3A_xA_y^2)f_5(2A_xA_y\boldsymbol{i} + A_x^2\boldsymbol{j} - A_y^2\boldsymbol{j}) +$

$+ (3A_x^5A_y - 10A_x^3A_y^3 + 3A_xA_y^5)f_6\boldsymbol{k}$;

clasa $\bar{3}m$ $(m \perp X)$: $\Phi = f_0 + A_z(A_y^3 - 3A_x^2A_y)f_1$, $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}(6/mmm) +$

$+ A_zf_4(2A_xA_y\boldsymbol{i} + A_x^2\boldsymbol{j} - A_x^2\boldsymbol{j}) + (A_y^3 - 3A_x^2A_y)f_5\boldsymbol{k} +$

$+ A_z(A_y^3 - 3A_x^2A_y)f_6(A_x\boldsymbol{i} + A_y\boldsymbol{j})$;

clasa $\bar{3}$: $\Phi = \Phi(6/m) + A_z(A_x^3 - 3A_xA_y^2)f_2 + A_z(A_y^3 - 3A_x^2A_y)f_3,$

$$V = V(6/m) + (A_x^3 - 3A_xA_y^2)f_7 k + (A_y^3 - 3A_x^2A_y)f_8 k +$$

$$+ A_z f_9(2A_xA_y i + A_x^2 j - A_y^2 j) + A_z f_{10}(A_x^2 i - A_y^2 i - 2A_xA_y j) +$$

$$+ A_z(A_x^3 - 3A_xA_y^2)f_{11}(A_x i + A_y j) + A_z(A_y^3 - 3A_x^2A_y)f_{12}(A_x i + A_y j).$$

Seria $\bar{4}3m$, $f = f(\Sigma A_x^2, A_xA_yA_z, \Sigma A_y^2A_z^2)$:

clasa $\bar{4}3m$: $\Phi = f$, $V = f_1\Sigma A_x i + f_2\Sigma A_yA_z i + f_3\Sigma A_x^3 i$;

clasa 23: $\Phi = f_0 + (A_x^2 - A_y^2)(A_y^2 - A_z^2)(A_z^2 - A_x^2)f_1$, $V = V(\bar{4}3m) +$

$$+ f_4\Sigma A_x(A_y^2 - A_z^2)i + f_5\Sigma A_yA_z(A_y^2 - A_z^2)i + f_6\Sigma A_x^3(A_y^2 - A_z^2)i.$$

Seria $m3m$, $f = f(\Sigma A_x^2, \Sigma A_y^2A_z^2, A_x^2A_y^2A_z^2)$:

clasa $m3m$: $\Phi = f$, $V = f_1\Sigma A_x i + f_2\Sigma A_x^3 i + A_xA_yA_z f_3\Sigma A_yA_z i$;

clasa $m3$: $\Phi = f_0 + (A_x^2 - A_y^2)(A_y^2 - A_z^2)(A_z^2 - A_x^2)f_1$, $V = V(m3m) +$

$$+ f_4\Sigma A_x(A_y^2 - A_z^2)i + A_xA_yA_z f_5\Sigma A_x(A_y^2 - A_z^2)i +$$

$$+ [\Sigma A_x^4(A_y^2 - A_z^2)] f_6\Sigma A_x i;$$

clasa 432: $\Phi = f_0 + A_xA_yA_z(A_x^2 - A_y^2)(A_y^2 - A_z^2)(A_z^2 - A_x^2)f_1$,

$$V = V(m3m) + f_4\Sigma A_yA_z(A_y^2 - A_z^2)i + A_xA_yA_z f_5\Sigma A_x(A_y^2 - A_z^2)i +$$

$$+ A_xA_yA_z f_6\Sigma A_x^3(A_y^2 - A_z^2)i.$$

Seria ∞m, $f = f(A_z, A_x^2 + A_y^2)$:

clasa ∞m: $\Phi = f$, $V = f_1 k + f_2(A_x i + A_y j)$;

clasa ∞: $\Phi = f$, $V = V(\infty m) + f_3(A_y i - A_x j)$.

Seria ∞/mm, $f = f(A_z^2, A_x^2 + A_y^2)$:

clasa ∞/mm : $\Phi = f$, $\boldsymbol{V} = A_z f_1 \boldsymbol{k} + f_2 (A_x \boldsymbol{i} + A_z \boldsymbol{j})$;

clasa $\infty 2$: $\Phi = f$, $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\ (\infty/mm) + A_z f_3 (A_y \boldsymbol{i} - A_x \boldsymbol{j})$;

clasa ∞/m : $\Phi = f$, $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\ (\infty/mm) + f_3 (A_y \boldsymbol{i} - A_x \boldsymbol{j})$.

Seria $\infty\infty m$, $f = f(\Sigma A_x^2)$:

clasele $\infty\infty m$ și $\infty\infty$: $\Phi = f$, $\boldsymbol{V} = f \Sigma A_x \boldsymbol{i}$.

Observații. 1. Pentru simplificarea scrierii, termenii scriși deja în una dintre formulele precedente sînt notați cu simbolurile $\boldsymbol{V}(mm2)$, $\boldsymbol{V}(mmm)$ etc.

2. Semnul Σ din formulele pentru seriile $\bar{4}3m$, $m3m$ și $\infty\infty m$ înseamnă însumarea în raport cu permutarea ciclică a indicilor x, y, z și a versorilor $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$; de exemplu, $\Sigma A_y A_z \boldsymbol{i} = A_y A_z \boldsymbol{i} + A_z A_x \boldsymbol{j} + A_x A_y \boldsymbol{k}$.

principali (și anume, de produsul dintre invarianții principali A_x^2 și A_y^2). De aici rezultă că oricare dintre funcțiile de invarianții principali precum și de invariantul suplimentar poate fi scrisă sub forma

$$\Phi(A_z, A_x^2, A_y^2, A_x A_y) = f_0(A_z, A_x^2, A_y^2) + A_x A_y f_1(A_z, A_x^2, A_y^2); \quad (87.6)$$

iar această formă de scriere este reprezentată în tabel sub forma

$$\Phi = f_0 + A_x A_y f_1.$$

Avantajul cel mai important al acestei forme de scriere este univocitatea ei. Într-adevăr, funcțiile f_0 și f_1 se definesc din funcțiile Φ într-un mod unic. Funcția f_0 este componenta pară față de $A_x A_y$ a funcției Φ, iar $A_x A_y f_1$ componenta impară; de aceea

$$f_0 = \frac{1}{2}[\Phi(A_z, A_x^2, A_y^2; A_x A_y) + \Phi(A_z, A_x^2, A_y^2; -A_x A_y)],$$

$$f_1 = \frac{1}{2A_x A_y}[\Phi(A_z, A_x^2, A_y^2; A_x A_y) - \Phi(A_z, A_x^2, A_y^2; -A_x A_y)].$$

Conform tabelului 87.1, pentru clasa $mm2$ funcția vectorială generală are forma

$$\boldsymbol{V} = A_x f_1 \boldsymbol{i} + A_y f_2 \boldsymbol{j} + f_3 \boldsymbol{k}, \quad (87.7)$$

iar cea potențială, după cum rezultă din relațiile (87.3) și (87.4), forma

$$V = \frac{\partial f}{\partial A_x} \boldsymbol{i} + \frac{\partial f}{\partial A_y} \boldsymbol{j} + \frac{\partial f}{\partial A_z} \boldsymbol{k}, \tag{87.8}$$

unde f_1, f_2, f_3 și f sînt funcții arbitrare de invarianții principali A_z, A_x^2 și A_y^2. Pentru clasa 2, funcția vectorială generală este de forma

$$V = (A_x f_1 + A_y f_2)\,\boldsymbol{i} + (A_x f_3 + A_y f_4)\,\boldsymbol{j} + (f_5 + A_x A_y f_6)\,\boldsymbol{k} \tag{87.9}$$

(în tabel, pentru simplificare, o parte dintre termeni este notată cu $V(mm2)$; aici toți termenii sînt scriși sub formă explicită și sînt indexate funcțiile arbitrare f_α; subliniem că funcția f_1 din această expresie nu coincide cu funcția cu același indice din relația (87.6)), iar cea de potențial, forma

$$V = \frac{\partial \Phi}{\partial A_x} \boldsymbol{i} + \frac{\partial \Phi}{\partial A_y} \boldsymbol{j} + \frac{\partial \Phi}{\partial A_z} \boldsymbol{k}, \tag{87.10}$$

unde

$$\Phi = f_0 + A_x A_y f_1;$$

aici toți f_α sînt funcții ale invarianților principali (indexarea funcțiilor f din expresiile pentru Φ și pentru V se face independent astfel încît coincidenței indicilor funcțiilor din aceste expresii nu trebuie să i se dea nici o importanță).

Așa cum s-a remarcat deja, în tabelele 87.1 și 87.2 sînt date formele cele mai generale ale legăturii funcționale, compatibile cu simetriile cristalelor. Însă dintre toate funcțiile scalare posibile, de argument vectorial sau tensorial, un loc deosebit de important îl ocupă funcțiile raționale întregi, adică acele funcții pentru care componentele funcției sînt polinoame în componentele argumentului (v. Döring, 1958; Smith, Smith and Rivlin, 1963; Smith and Rivlin, 1964; Smith and Kiral, 1969).

Să revenim din nou la tabelul 87.1. Vom lua ca exemplu clasa $\bar{4}2m$ din seria $4/mmm$. Să examinăm funcțiile vectoriale generale și funcțiile vectoriale de potențial, care să fie funcții întregi, raționale, de gradul patru.

Funcţia vectorială generală, $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}(\boldsymbol{A})$, care concordă cu simetria cristalului, după cum rezultă din tabelul 87.1, are forma

$$\boldsymbol{V} = (A_z f_1 + A_x A_y f_2)\boldsymbol{k} + (f_3 + A_x A_y A_z f_4)(A_x \boldsymbol{i} + A_y \boldsymbol{j}) + \\ + (A_z f_5 + A_x A_y f_6)(A_y \boldsymbol{i} + A_y \boldsymbol{j}). \quad (87.11)$$

Pentru ca în componentele V_i să existe toţi termenii necesari, pînă la termenii de gradul patru în componenta A_k inclusiv, trebuie ca în funcţiile f_α să fie prezenţi toţi termenii, pînă la inclusiv gradul:

Funcţia	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6
Gradul	3	2	3	0	2	1

În acest caz drept invarianţi principali servesc $A_x^2 + A_y^2$, A_z^2 şi $A_x^2 A_y^2$. Deoarece toţi aceştia sînt de grad par în raport cu $\boldsymbol{A}$, termenii de grad impar din funcţiile f_α sînt identic egali cu zero. Forma generală a funcţiilor f_α este

$$\begin{aligned} f_1 &= a_1 + c_1(A_x^2 + A_y^2) + c_2 A_z^2, \\ f_2 &= b_1 + d_1(A_x^2 + A_y^2) + d_2 A_z^2, \\ f_3 &= a_2 + c_3(A_x^2 + A_y^2) + c_4 A_z^2, \\ f_4 &= d_3, \\ f_5 &= b_2 + d_4(A_x^2 + A_y^2) + d_5 A_z^2, \\ f_6 &= c_5, \end{aligned} \quad (87.12)$$

unde $a_1, \ldots, d_5$ sînt nişte constante. Componentele funcţiei vectoriale $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{A})$, compatibilă cu simetria clasei $\bar{4}2m$, reprezintă coeficienţii versorilor $\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{j}$ şi, respectiv, $\boldsymbol{k}$

$$\begin{aligned} V_x &= A_x f_3 + A_x^2 A_y A_z f_4 + A_y A_z f_5 + A_x A_y^2 f_6, \\ V_y &= A_y f_3 + A_x A_y^2 A_z f_4 + A_x A_z f_5 + A_x^2 A_y f_6, \\ V_z &= A_z f_1 + A_x A_y f_2. \end{aligned} \quad (87.13)$$

Înlocuind în aceste formule dezvoltările funcţiei f_α, scrise în (87.12), obţinem

$$V_x = a_2A_x + b_2A_yA_z + c_3A_x(A_x^2 + A_y^2) + c_4A_xA_z^2 +$$
$$+ c_5A_xA_y^2 + d_3A_x^2A_yA_z + d_4(A_x^2 + A_y^2)\,A_yA_z + d_5A_yA_z^3,$$
$$V_y = a_2A_y + b_2A_xA_z + c_3A_y(A_x^2 + A_y^2) + c_4A_yA_z^2 +$$
$$+ c_5A_x^2A_y + d_3A_xA_y^2A_z + d_4A_x(A_x^2 + A_y^2)A_z + d_5A_xA_z^3, \quad (87.14)$$
$$V_z = a_1A_z + b_1A_xA_y + c_1(A_x^2 + A_y^2)A_z + c_2A_z^3 +$$
$$+ d_1A_xA_y(A_x^2 + A_y^2) + d_2A_xA_yA_z^2.$$

O astfel de funcţie vectorială, raţională, întreagă, generală, de gradul patru este compatibilă cu simetria cristalelor din clasa $\bar{4}2m$.

Să construim acum funcţia vectorială de potenţial, de acelaşi grad. Pentru aceasta este necesar să transcriem potenţialul pînă la termenii de gradul cinci inclusiv. Conform tabelului 87.1, pentru clasa $\bar{4}2m$, potenţialul este egal cu

$$\Phi = f_0 + A_xA_yA_zf_1. \quad (87.15)$$

Pentru a obţine toţi termenii care ne interesează, în expresia funcţiei f_0 trebuie scrişi şi termenii pînă la gradul patru, iar în expresia lui f_1 pînă la termenii de gradul doi inclusiv

$$f_0 = h_1 + l_1(A_x^2 + A_y^2) + l_2A_z^2 + n_1A_x^2A_y^2 +$$
$$+ n_2(A_x^2 + A_y^2)^2 + n_3(A_x^2 + A_y^2)\,A_z^2 + n_4A_z^4, \quad (87.16)$$
$$f_1 = m_1 + p_1(A_x^2 + A_y^2) + p_2A_z^2.$$

Înlocuind aceste expresii în (87.15), obţinem potenţialul

$$\Phi = h_1 + l_1(A_x^2 + A_y^2) + l_2A_z^2 + mA_xA_yA_z + n_1A_x^2A_y^2 + n_2(A_x^2 +$$
$$+ A_y^2)^2 + n_3(A_x^2 + A_y^2)\,A_z^2 + n_4A_z^4 + p_1A_xA_y(A_x^2 + A_y^2)\,A_z +$$
$$+ p_2\,A_xA_yA_z^3. \quad (87.17)$$

Derivatele potenţialului sînt egale cu componentele funcţiei vectoriale de potenţial

$$V_x = \frac{\partial \Phi}{\partial A_x} = 2l_1 A_x + m_1 A_y A_z + 2n_1 A_x A_y^2 + 4n_2 A_x (A_x^2 + A_y^2) +$$

$$+ 2n_3 A_x A_z^2 + p_1 (3A_x^2 + A_y^2) A_y A_z + p_2 A_y A_z^3,$$

$$V_y = \frac{\partial \Phi}{\partial A_y} = 2l_1 A_y + m_1 A_x A_z + 2n_1 A_x^2 A_y + 4n_2 A_y (A_x^2 + A_y^2) +$$

$$+ 2n_3 A_y A_z^2 + p_1 A_x (A_x^2 + 3A_y^2) A_z + p_2 A_x A_z^3,$$

$$V_z = \frac{\partial \Phi}{\partial A_z} = 2l_2 A_z + m_1 A_x A_y + 2n_3 (A_x^2 + A_y^2) A_z +$$

$$+ 4n_3 A_z^3 + p_1 A_x A_y (A_x^2 + A_y^2) + 3p_2 A_x A_y A_z^2. \tag{87.18}$$

În timp ce funcţia vectorială generală de gradul patru, compatibilă cu simetria cristalelor din clasa $\bar{4}2m$, se defineşte cu ajutorul a paisprezece coeficienţi constanţi, funcţia de potenţial analoagă are nevoie numai de nouă. Prin urmare, pentru ca funcţia vectorială, de gradul patru, cu simetria $\bar{4}2m$, să fie potenţială coeficienţii ei trebuie să satisfacă cinci condiţii. Aceste condiţii sînt uşor de găsit, comparînd formulele (87.14) şi (87.18)

$$\begin{gathered} b_1 = b_2, \quad c_1 = c_4, \\ 2d_1 = d_3 = 2d_4, \quad d_2 = 3d_5. \end{gathered} \tag{87.19}$$

Funcţiile vectoriale raţionale întregi sînt strîns legate de dezvoltările vectoriale de forma (87.1). Să examinăm o astfel de dezvoltare a funcţiei vectoriale, $V(A)$

$$V_i = T_i^{(1)} + T_{ij}^{(2)} A_j + T_{ijk}^{(3)} A_j A_k + T_{ijkl}^{(4)} A_j A_k A_l + T_{ijklm}^{(5)} A_j A_k A_l A_m. \tag{87.20}$$

Aici tensorii $\mathbf{T}^{(1)}, \ldots, \mathbf{T}^{(5)}$ joacă rolul unor tensori de material. Simetria internă a tuturor tensorilor este $V[V^{n-1}]$; ei sînt simetrici în raport cu toţi indicii, în afară de primul. Componentele lor pot

fi calculate prin derivarea funcţiei $V(A)$ în punctul $A = 0$, şi anume

$$T_i^{(1)} = (V_i)_{A=0}, \qquad T_{ij}^{(2)} = \left(\frac{\partial V_i}{\partial A_j}\right)_{A=0},$$

$$T_{ijk}^{(3)} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 V_i}{\partial A_j \partial A_k}\right)_{A=0}, \qquad T_{ijkl}^{(4)} = \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 V_i}{\partial A_j \partial A_k \partial A_l}\right)_{A=0},$$

$$T_{ijklm}^{(5)} = \frac{1}{4!}\left(\frac{\partial^4 V_i}{\partial A_j \partial A_k \partial A_l \partial A_m}\right)_{A=0}. \qquad (87.21)$$

Evident, pentru orice n,

$$T_{i_1 \ldots i_n}^{(n)} = \frac{1}{(n-1)!}\left(\frac{\partial^{n-1} V_{i_1}}{\partial A_{i_2} \ldots \partial A_{i_n}}\right)_{A=0}. \qquad (87.22)$$

Folosind aceste formule, se pot găsi componentele tensorilor $\mathbf{T}^{(n)}$, invarianţi în raport cu grupurile punctuale date, formate din funcţii vectoriale raţionale, întregi, construite cu ajutorul tabelului 87.1. De exemplu, cu ajutorul dezvoltării (87.14) se pot găsi componentele tensorilor $\mathbf{T}^{(n)}$, invarianţi faţă de grupul $\bar{4}2m$. Să facem acest lucru.

Evident,

$$T_i^{(1)} = 0, \qquad (i = 1, 2, 3). \qquad (87.23)$$

Acest fapt nici nu este de mirare, $\bar{4}2m$ fiind o clasă nepiroelectrică.

Să găsim componentele tensorului $\mathbf{T}^{(2)}$. Dintre ele sînt diferite de zero numai

$$T_{11} = \frac{\partial V_x}{\partial A_x} = a_2, \quad T_{22} = \frac{\partial V_y}{\partial A_y} = a_2, \quad T_{33} = \frac{\partial V_z}{\partial A_z} = a_1 \qquad (87.24)$$

(pentru a apărea notaţiile obişnuite ale componentelor tensoriale, indicii lor literali trebuie înlocuiţi cu indici numerici). Aşa cum era de aşteptat, toate componentele nediagonale sînt egale cu zero, iar $T_{11} = T_{22}$.

Să găsim, în continuare, componentele tensorului $\mathbf{T}^{(3)}$; simetria lui internă este $V[V^2]$. Sînt diferite de zero componentele

$$T_{123} = T_{132} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V_x}{\partial A_y \, \partial A_z} = \frac{1}{2} b_2,$$

$$T_{231} = T_{213} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V_y}{\partial A_z \, \partial A_x} = \frac{1}{2} b_2, \tag{87.25}$$

$$T_{312} = T_{321} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V_z}{\partial A_x \, \partial A_y} = \frac{1}{2} b_1.$$

Aşadar, am obţinut componentele tensorului coeficienţilor piezoelectrici (sau electrooptici) pentru clasa $\bar{4}2m$.

În fine, tensorul $\mathbf{T}^{(4)}$ are diferite de zero următoarele componente

$$T_{1111} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_x}{\partial A_x^3} = c_3,$$

$$T_{1122} = T_{1212} = T_{1221} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_x}{\partial A_x \, \partial A_y^2} = \frac{1}{3} (c_3 + c_5),$$

$$T_{1133} = T_{1313} = T_{1331} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_x}{\partial A_x \, \partial A_z^2} = \frac{1}{3} c_4,$$

$$T_{2112} = T_{2121} = T_{2211} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_y}{\partial A_x^2 \, \partial A_y} = \frac{1}{3} (c_3 + c_5),$$

$$T_{2222} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_y}{\partial A_y^3} = c_3, \tag{87.26}$$

$$T_{2233} = T_{2323} = T_{2332} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_y}{\partial A_y \, \partial A_z^2} = \frac{1}{3} c_4,$$

$$T_{3113} = T_{3131} = T_{3311} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_z}{\partial A_x^2 \, \partial A_z} = \frac{1}{3} c_1,$$

$$T_{3223} = T_{3232} = T_{3322} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_z}{\partial A_y^2 \, \partial A_z} = \frac{1}{3} c_1,$$

$$T_{3333} = \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V_z}{\partial A_z^3} = c_2.$$

Simetria internă a acestui tensor este egală cu $V[V^3]$. El poate descrie, de exemplu, polarizabilitatea cubică și, respectiv, generarea armonicei luminoase de ordinul trei, în cristalele din clasele 422, $4mm$, $\bar{4}2m$ și $4/mmm$ (deoarece acest tensor este de tip par, el are aceeași formă pentru toate clasele care fac parte dintr-un subsistem).

Tensorul $\mathbf{T}^{(5)}$, de simetrie internă $V[V^4]$, i se propune cititorului să-l reprezinte singur.

Funcțiile de potențial vectoriale, raționale, întregi se utilizează complet analog pentru construirea tensorilor simetrici în raport cu toți indicii.

Așadar, tabelul 87.1 permite scrierea fără nici o greutate a tensorilor nu numai de rang înalt, ci și de rang oricît de înalt, invarianți în raport cu orice grup dat. Însă în locul tensorilor de material de ranguri înalte se pot utiliza și direct funcții vectoriale, raționale și întregi. Scrierea proprietăților de material cu ajutorul lor este mai compactă decît atunci cînd se folosesc tensorii de material; într-adevăr, formulele (87.14) sau (87.18) ocupă un loc mai restrîns decît cel necesar pentru patru tensori de rangul doi, trei, patru și cinci, care ar purta aceeași informație. În felul acesta sîntem conduși la o generalizare esențială a noțiunii de tensori de material — la ideea de funcții vectoriale sau funcții tensoriale, de material *.

Tabelul 87.2 conține potențialele unui tensor simetric de rangul doi, compatibile cu simetria cristalelor și a texturilor. Funcțiile tensoriale generale de acest tip nu au fost construite deocamdată. Forma potențialelor este aceeași pentru toate clasele care fac parte dintr-un subsistem. Subsistemele sînt grupate în serii; în cazul de față, seriile coincid cu sistemele.

Cu ajutorul acestor potențiale se obține ușor generalizarea legii lui Hooke, fie sub forma

$$\varepsilon_\lambda = \frac{\partial \Phi(\sigma)}{\partial \sigma_\lambda}, \qquad (87.27)$$

fie sub forma

$$\sigma_\lambda = \frac{\partial \Phi(\varepsilon)}{\partial \varepsilon_\lambda}. \qquad (87.28)$$

---

* Asemenea funcții își găsesc aplicație, în particular, în aparatul matematic al teoriei tranzițiilor de fază de speța a doua, exprimînd forma generală a dependenței potențialului termodinamic Φ de parametrul de disimetrie, $\mathbf{c}$ (v. § 66). În acest caz, pentru vectorii bidimensionali și pentru cei tridimensionali $\mathbf{c}$ este suficient să se folosească tabelul 87.1 (Sirotin, 1967; Sirotin și Mihelson, 1969), însă pentru vectorii $\mathbf{c}$ multidimensionali este necesară aplicarea unor metode matematice speciale (Gufan și Sahnenko, 1972).

Tabelul 87.2

Potențialele Φ(B) ale unui tensor simetric de rangul doi, B, compatibile cu simetria cristalelor și texturilor

---

Seria $\overline{1}$, $f = f(B_{xx}, B_{yy}, B_{zz}, B_{yz}, B_{zx}, B_{xy})$:

clasele 1 și $\overline{1}$: $\Phi = f$.

Seria $2/m$, $f = f(B_{xx}, B_{yy}, B_{zz}, B_{xy}, B_{xz}^2, B_{yz}^2)$:

clasele 2, m, $2/m$ ($2 \parallel Z$, $m \perp Z$) : $\Phi = f_0 + B_{xz}B_{yz}f_1$

Seria mmm, $f = f(B_{xx}, B_{yy}, B_{zz}, B_{yz}^2, B_{zx}^2, B_{xy}^2)$:

clasele 222, $mm2$, mmm : $\Phi = f_0 + B_{yz}B_{zx}B_{xy}f_1$.

Seria $\overline{3}m$, $f = f(B_{xx} + B_{yy}, B_{zz}, B_{xx}B_{yy} - B_{xy}^2,$

$B_{yz}^2 + B_{zx}^2, B_{yz}^3 - 3B_{xz}^3B_{yz}, B_{xx}^3 + 6B_{xx}^2B_{yy} + 9B_{xx}B_{yy}^2 - 12B_{xx}B_{xy}^2)$,

$$L_1 = (B_{xx} - B_{yy})\,B_{yz} + 2B_{xy}B_{xz},$$

$$L_2 = B_{xx}B_{xz}^2 + B_{yy}B_{yz}^2 + 2B_{xz}B_{yz}B_{xy},$$

$$L_3 = B_{yz}[(B_{xx} + B_{yy})^2 - 4(B_{yy}^2 - B_{xy}^2)] + 8B_{xx}B_{xy}B_{xz},$$

$$L_4 = (B_{xx} - B_{yy})\,B_{xz} - 2B_{xy}B_{yz},$$

$$L_5 = 3(B_{xx} - B_{yy})^2\,B_{xy} - 4B_{xy}^3,$$

$$L_6 = B_{xz}(B_{xz}^2 - 3\,B_{yz}^2),$$

$$L_7 = B_{xz}[(B_{xx} + B_{yy})^2 - 4(B_{yy}^2 - B_{xy}^2)] - 8B_{xx}B_{xy}B_{yz},$$

$$L_8 = (B_{xx} - B_{yy})\,B_{xz}B_{yz} + B_{xy}(B_{yz}^2 - B_{xz}^2)\,;$$

clasele 3 și $\overline{3}$: $\Phi = f_0 + \sum_{n=1}^{8} L_nf_n + L_1^2f_9 + L_2L_3f_{10} + L_1L_4f_{11}$;

clasele 32, $3m$, $\overline{3}m$: $\Phi = f_0 + \sum_{n=1}^{3} L_nf_n + L_1^2f_4 + L_2L_3f_5$.

Seria $4/mmm$, $f = f(B_{xx} + B_{yy}, B_{zz}, B_{xx}B_{yy}, B_{xy}^2, B_{xz}^2 + B_{yz}^2, B_{xz}^2B_{yz}^2)$,

$$L_1 = B_{xy}B_{xz}B_{yz},$$

$$L_2 = B_{xx}B_{yz}^2 + B_{yy}B_{xz}^2,$$

$$L_3 = B_{xy}(B_{xx} - B_{yy})),$$

$$L_4 = B_{xy}(B_{xz}^2 - B_{yz}^2),$$

$$L_5 = B_{xz}B_{yz}(B_{xx} - B_{yy}),$$

$$L_6 = B_{xz}B_{yz}(B_{xz}^2 - B_{yz}^2);$$

clasele 4, $\overline{4}$, $4/m$: $\Phi = f_0 \sum_{n=1}^{6} L_n f_n + L_1 L_2 f_7$;

clasele 422, $4mm$, $\overline{4}2m$, $4/mmm$: $\Phi = f_0 + L_1 f_1 + L_2 f_2 + L_1 L_2 f_3$.

Seria $6/mmm$, $f = f(B_{xx} + B_{yy}, B_{zz}, B_{xx}B_{yy} - B_{xy}^2, B_{xz}^2 + B_{yz}^2,$

$B_{xx}^3 + 6B_{xx}^2B_{yy} + 9B_{xx}B_{yy}^2 - 12B_{xx}B_{xy}^2, B_{xz}^6 - 6B_{xz}^4B_{yz}^2 + 9B_{xz}^2B_{yz}^4)$,

$$L_4 = B_{xx}B_{yz}^2 + B_{yy}B_{xz}^2 - 2B_{xy}B_{xz}B_{yz},$$

$$L_2 = B_{xx}(B_{xz}^4 + 3B_{yz}^4) + 2B_{yy}B_{xz}^2(B_{xz}^2 + 3B_{yz}^2) - 8B_{xy}B_{xz}^3B_{yz},$$

$$L_3 = B_{xz}^2[(B_{xx} + B_{yy})^2 - 4(B_{yy}^2 - B_{xy}^2)] -$$
$$- 2B_{xx}[(B_{xx} + 3B_{yy})(B_{xz}^2 + B_{yz}^2) - 4B_{xy}B_{xz}B_{yz}],$$

$$L_4 = B_{xy}(B_{xz}^2 - B_{yz}^2) + (B_{yy} - B_{xx})B_{xz}B_{yz},$$

$$L_5 = 3B_{xy}(B_{xx} - B_{yy})^2 - 4B_{xy}^3,$$

$$L_6 = B_{xz}B_{yz}[3(B_{xz}^2 - B_{yz}^2)^2 - 4B_{xz}^2B_{yz}^2],$$

$$L_7 = B_{xz}B_{yz}[(B_{xx} + B_{yy})^2 - 4(B_{yy}^2 - B_{xy}^2)] + 4B_{xx}B_{xy}(B_{yz}^2 - B_{xz}^2),$$

$$L_8 = B_{xy}[(B_{xz}^2 + B_{yz}^2)^2 + 4B_{yz}^2(B_{xz}^2 - B_{yz}^2)] - 4B_{xz}^3B_{yz}(B_{xx} - B_{yy});$$

clasele 6, $\overline{6}$, $6/m$: $\Phi = f_0 + \sum_{n=1}^{8} L_n f_n + L_1^2 f_0 + L_2 L_3 f_{10} + L_1 L_4 f_{11}$;

clasele 622, $6mm$, $\overline{6}m2$, $6/mmm$: $\Phi = f_0 + \sum_{n=1}^{3} L_n f_n + L_1^2 f_4 + L_2 L_3 f_5$.

Seria $m3m$, $f = (\Sigma B_{xx}, \Sigma B_{yy} B_{zz}, \Sigma B_{yz}^2, B_{xx} B_{yy} B_{zz}, B_{yz} B_{zx} B_{xy}, \Sigma B_{yz}^2 B_{zx}^2)$,

$$L_1 = \Sigma B_{xx}(B_{xy}^2 + B_{xz}^2),$$

$$L_2 = \Sigma B_{xx} B_{xy}^2 B_{xz}^2,$$

$$L_3 = \Sigma B_{yz}^2 B_{yy} B_{zz},$$

$$L_4 = \Sigma B_{xx}(B_{xy}^2 - B_{xz}^2),$$

$$L_5 = \Sigma B_{yy} B_{zz}(B_{yy} - B_{zz}),$$

$L_6 = \Sigma B^2$ [illegible] $_z - B_{yz}^2)$,

$$L_7 = \Sigma B_{yy} B_{zz}(B_{xy}^2 - B_{xz}^2),$$

$$L_8 = 2 B_{xy}^2 B_{xz}^2 (B_{yy} - B_{zz}):$$

clasele 23 şi $m3$: $\Phi = f_0 + \sum_{n=1}^{8} L_n f_n + L_1^2 f_9 + L_2 L_3 f_{10} + L_1 L_4 f_{11}$;

clasele 432, $\overline{4}3m$ şi $m3m$: $\Phi = f_0 + \sum_{n+1}^{3} L_n f_n + L_1^2 f_4 + L_2 L_3 f_5$.

Seria ∞/mm, $f = f(B_{xx} + B_{yy}, B_{zz}, B_{xx} B_{yy} - B_{xy}^2,$

$B_{xz}^2 + B_{yz}^2, 2 B_{xy} B_{xz} B_{yz} - B_{xx} B_{yz}^2 - B_{yy} B_{xz}^2)$;

clasele ∞ şi ∞/m: $\Phi = f_0 + [(B_{xx} - B_{yy}) B_{xz} B_{yz} - B_{xy}(B_{xz}^2 - B_{yz}^2)] f_1$;

clasele $\infty 2$, ∞m şi ∞/mm; $\Phi = f$.

Seria $\infty\infty m$, $f = f\,(\Sigma B_{xx}, \Sigma(B_{yy}B_{zz} - B_{xy}B_{xz}),$

$$B_{xx}B_{yy}B_{zz} + 2B_{yz}B_{zx}B_{xy} - \Sigma B_{xx}B_{yz}^2);$$

clasele $\infty\infty$ și $\infty\infty m$: $\Phi = f$.

Observație. Semnul Σ din formulele pentru seriile $m3m$ și $\infty\infty m$ indică însumarea după permutările ciclice ale indicilor, x, y, z.

În acest caz, firește, este necesar să avem în vedere regulile de indexare

$$\sigma_\lambda = \sigma_{ij} \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots, 6), \tag{87.29}$$

$$\varepsilon_\lambda = \begin{cases} \varepsilon_{ij} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1,\ 2,\ 3), \\ 2\,\varepsilon_{ij} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4,\ 5,\ 6); \end{cases} \tag{87.30}$$

de exemplu, scriind potențialul $\Phi(\varepsilon) = \Phi(\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_6)$, în locul lui B_{xx} trebuie scris ε_1, însă în locul lui B_{xy} trebuie introdus $1/2\ \varepsilon_6$.

Potențialele tensoriale astfel scrise pot fi utilizate și pentru deducerea formei tensorilor ce caracterizează corecțiile la legea Hooke, adică a tensorilor $\mathbf{s}^{(2)}$, $\mathbf{s}^{(3)}$, ... din dezvoltarea (87.2) și a tensorilor $\mathbf{c}^{(2)}$, $\mathbf{c}^{(3)}$, ... din dezvoltarea

$$\sigma_\lambda = c^{(1)}_{\lambda\mu}\varepsilon_\mu + c^{(2)}_{\lambda\mu\nu}\varepsilon_\mu\varepsilon_\nu + c^{(3)}_{\lambda\mu\nu\varkappa}\varepsilon_\mu\varepsilon_\nu\varepsilon_\varkappa + \ldots \tag{87.31}$$

pentru cristalele din orice clasă (mai exact, din orice subsistem). Anume, pentru determinarea coeficienților $s^{(2)}_{\lambda\mu\nu}$ și $c^{(2)}_{\lambda\mu\nu}$, sînt necesare potențiale care se exprimă prin polinoame de gradul trei în componentele tensoriale, iar pentru calcularea coeficienților $s^{(3)}_{\lambda\mu\nu\varkappa}$ și $c^{(3)}_{\lambda\mu\nu\varkappa}$ — polinoame de gradul patru.

De exemplu, cu o precizie de pînă la termenii de gradul trei inclusiv, potențialul $\Phi(\sigma)$ pentru cristalele din subsistemul principal al sistemului cubic este egal cu

$$\begin{aligned}\Phi(\sigma) &= a(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) + b_1(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)^2 + b_2(\sigma_2\sigma_3 + \\ &+ \sigma_3\sigma_1 + \sigma_1\sigma_2) + b_3(\sigma_4^2 + \sigma_5^2 + \sigma_6^2) + d_1(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)^3 + \\ &+ d_2(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)(\sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1 + \sigma_1\sigma_2) + d_3(\sigma_1 + \sigma_2 + \\ &+ \sigma_3)(\sigma_4^2 + \sigma_5^2 + \sigma_6^2) + d_4\sigma_1\sigma_2\sigma_3 + d_5\sigma_4\sigma_5\sigma_6 + \\ &+ d_6(\sigma_1\sigma_5^2 + \sigma_1\sigma_6^2 + \sigma_2\sigma_6^2 + \sigma_2\sigma_4^2 + \sigma_3\sigma_4^2 + \sigma_3\sigma_5^2).\end{aligned} \tag{87.32}$$

Evident,

$$s_{\lambda\mu\nu}^{(2)} = \frac{1}{2} \frac{\partial^3 \Phi}{\partial \sigma_\lambda \, \partial \sigma_\mu \, \partial \sigma_\nu}; \tag{87.33}$$

prin urmare, coeficienţii deformabilităţii elastice de ordinul doi sînt

$$\begin{aligned}
&S_{111} = S_{222} = S_{333} = 3d_1, \\
&S_{122} = S_{133} = S_{233} = S_{211} = S_{311} = S_{322} = 3d_1 + d_2; \\
&S_{123} = 3d_1 + \frac{3}{2} d_2 + \frac{1}{2} d_4, \\
&S_{144} = S_{255} = S_{366} = d_3, \qquad (87.34) \\
&S_{155} = S_{166} = S_{266} = S_{244} = S_{344} = S_{355} = d_3 + d_6, \\
&S_{456} = \frac{1}{2} d_5;
\end{aligned}$$

toţi ceilalţi coeficienţi (în afară de coeficienţii care se deosebesc de cei scrişi numai prin permutarea indicilor) sînt egali cu zero. Dealtfel, şi în acest caz este mai comod să se deducă formulele care exprimă direct deformările prin tensiuni, aplicînd diferenţierea potenţialului

$$\begin{aligned}
\varepsilon_1 = {} & a + 2b_1\sigma_1 + (2b_1 + b_2)(\sigma_2 + \sigma_3) + 3d_1\sigma_1^2 + (6d_1 + 2d_2)\,\sigma_1(\sigma_2 + \sigma_3) + \\
& + (3d_1 + d_2)(\sigma_2^2 + \sigma_3^2) + (6d_1 + 3d_2 + d_4)\,\sigma_2\sigma_3 + d_3\sigma_4^2 + d_6(\sigma_5^2 + \sigma_6^2), \\
\varepsilon_4 = {} & 2b_3\sigma_4 + 2d_3\sigma_1\sigma_4 + (2d_3 + 2d_6)(\sigma_2 + \sigma_3)\sigma_4 + d_5\sigma_5\sigma_6; \qquad (87.35)
\end{aligned}$$

formulele pentru restul componentelor se deosebesc de cele scrise numai prin permutarea ciclică a indicilor.

ANEXE

A. SISTEME DE COORDONATE CRISTALOGRAFICE ŞI CRISTALOFIZICE

Aici sînt reunite regulile de alegere a sistemelor de coordonate cristalografice şi cristalofizice pentru cristalele tuturor claselor (v. §§ 4, 16, 86). În tabelul A.1 sînt date proiecţiile stereografice, care arată plasarea reciprocă a elementelor de simetrie ale unui cristal, a axelor de coordonate cristalografice şi cristalofizice (Nye, 1967, anexa 2).

În tabelul A.2 sînt cuprinse regulile de alegere formulate pe cît posibil mai aproape de *IRE Standards* şi care au fost analizate amănunţit în § 86 pentru sistemele de coordonate cristalografice şi cristalofizice standard, ale tuturor celor 32 de clase, ca şi regulile de alegere a modificaţiei dextrogire în cele 11 clase enantiomorfe (asupra alegerii sistemelor de coordonate cristalografice în cristalele singoniilor triclinică şi monoclinică, v. Delone, Padurov, Aleksandrov, 1934; Delone, Galiulin, Ştorghin, 1974).

N o t a ţ i i l e:

X, Y, Z — axele sistemului de coordonate cristalografic;

X_1, X_2, X_3 — axele sistemului de coordonate cristalofizic;

α, β, γ — unghiurile dintre direcţiile pozitive ale axelor Y şi Z, Z şi, respectiv, X, X şi Y;

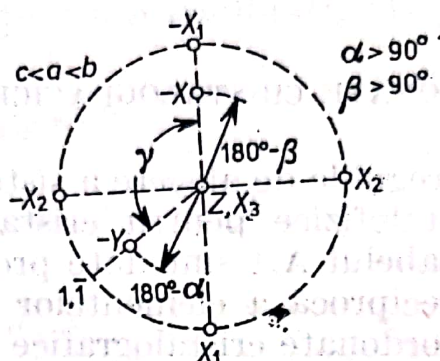
sc (sc_1) indică faptul că axa cristalografică corespunzătoare este orientată după cel mai scurt vector al reţelei; sc_2 — după cel mai scurt vector al reţelei, necoliniar cu primul; sc_3 — după cel mai scurt vector al reţelei, necoplanar cu primii doi; $\perp Y\mathrm{sc}_1$ înseamnă că axa dată este orientată după cel mai scurt dintre vectorii reţelei, perpendicular pe axa Y; celelalte notaţii se înţeleg prin analogie;

$s_{\lambda\mu}$ — coeficienţii deformabilităţii elastice, $d_{i\lambda}$ — coeficienţii piezoelectrici, $\pi_{\lambda\mu}$ — coeficienţii piezooptici, G — coeficientul de giraţie.

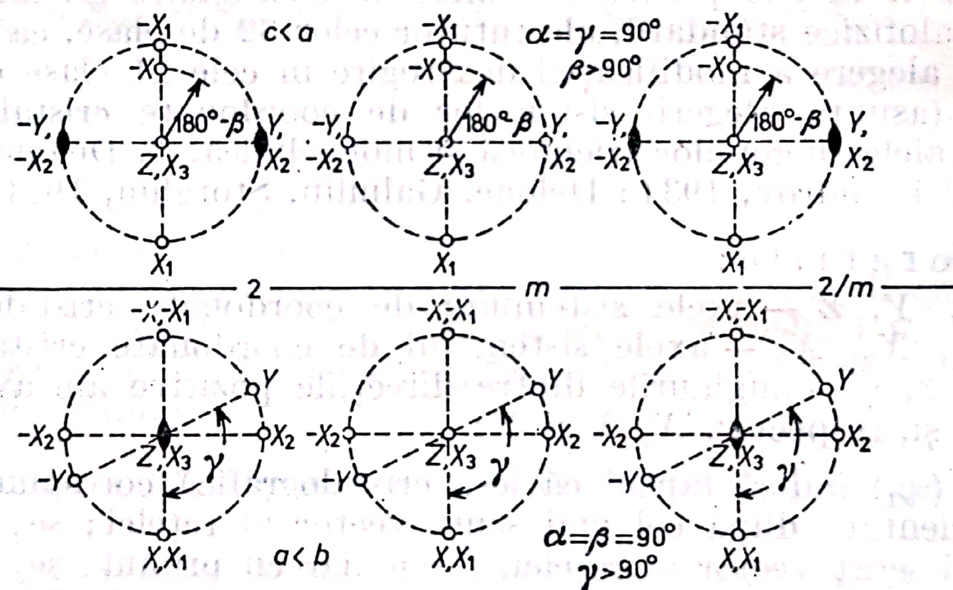
Atît sistemele cristalografice cît şi cele cristalofizice sînt dextrogire dacă au unghiurile dintre axele corespunzătoare (X şi X_1, Y şi X_2, Z şi X_3) mai mici ca 90°. Modificaţiile enantiomorfe sînt astfel amplasate faţă de sistemele de coordonate introduse încît una trece în cealaltă prin inversie.

Alegerea axelor de coordonate cristalografice și cristalofizice pentru cristalele celor 32 de clase
(proiecții stereografice)

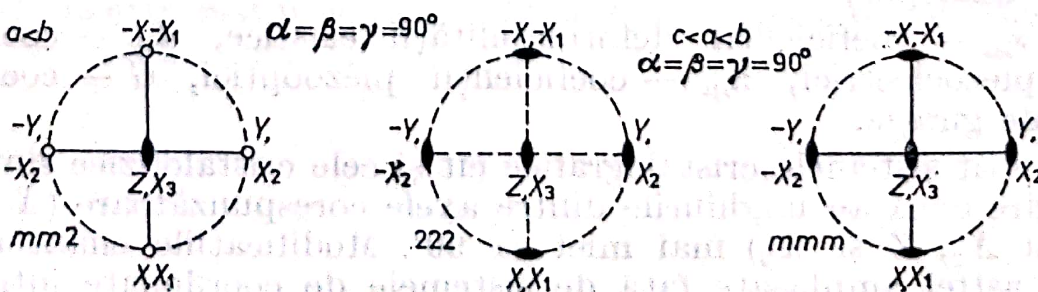
Singonia triclinică



Singonia monoclinică
(sus — amplasarea admisă, jos — amplasarea modificată)

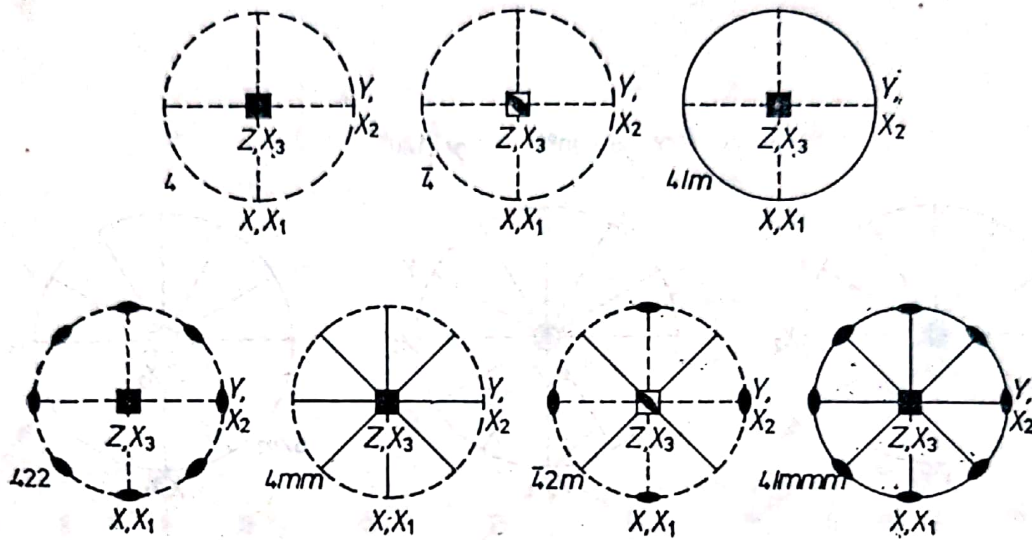


Singonia rombică



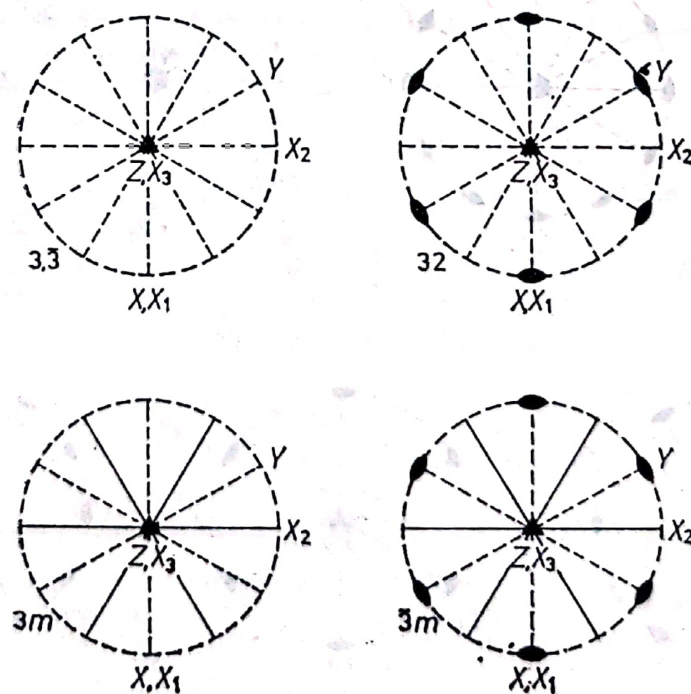
Singonia tetragonală

$a=b\neq c,\ \alpha=\beta=\gamma=90°$



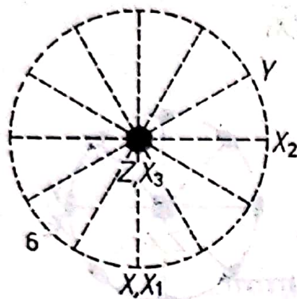
Singonia hexagonală, sistemul trigonal

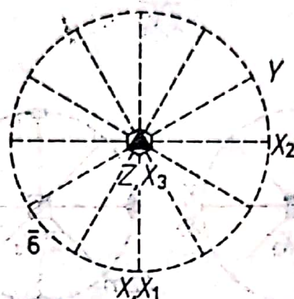
$a=b,\ \alpha=\beta=90°,\ \gamma=120°$

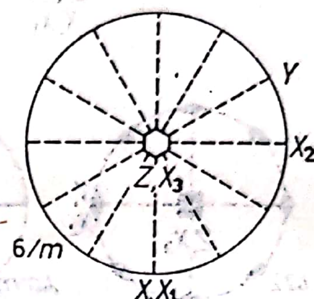


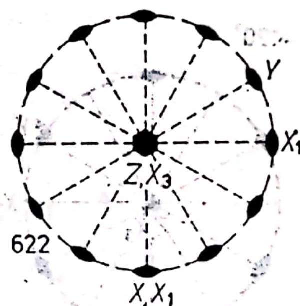
Sistemul hexagonal

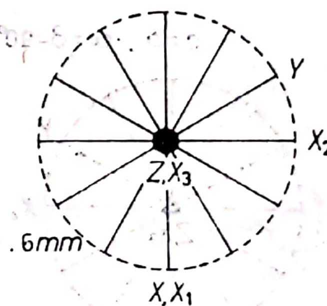
$a = b \quad \alpha = \beta = 90° \quad \gamma = 120°$

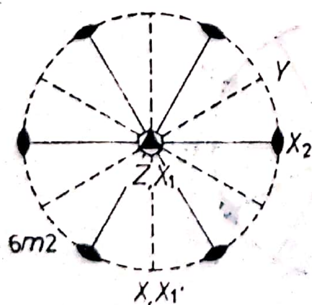


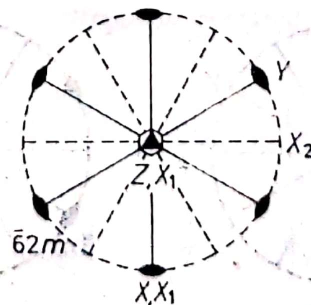


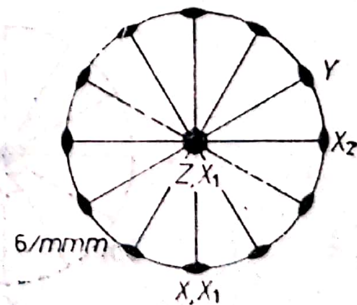




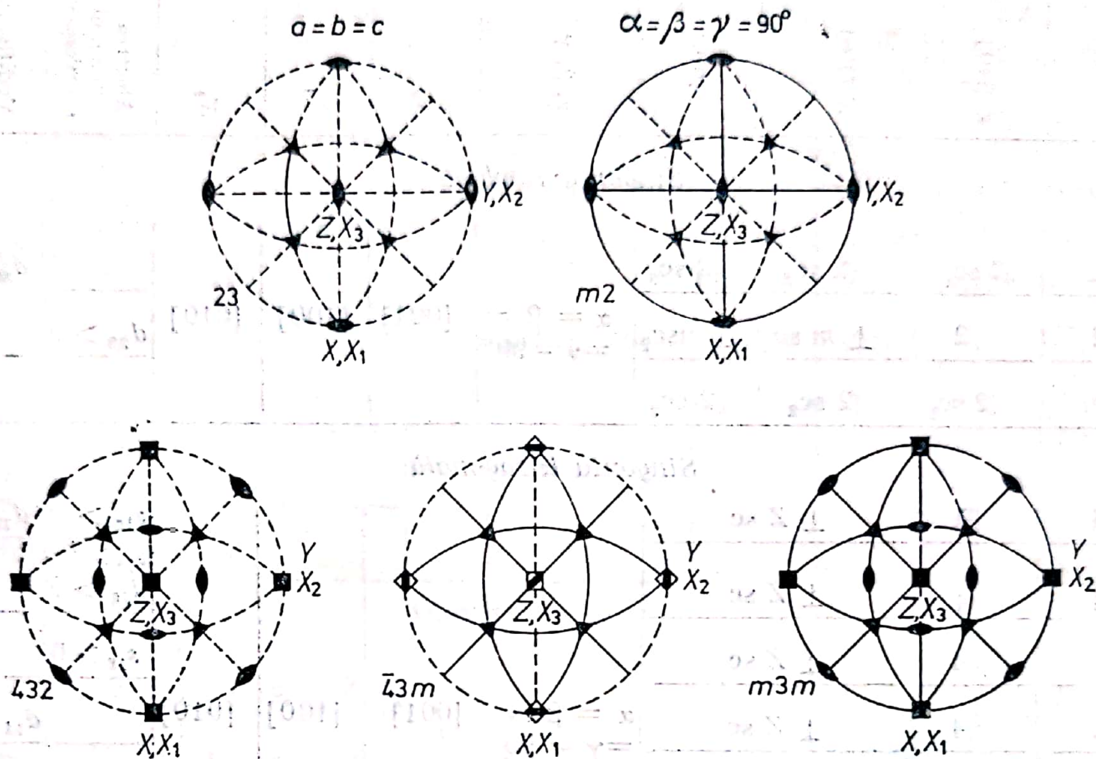








Singonia cubică



Tabelul A.2

Regulile de alegere a sistemelor de coordonate și a modificațiilor dextrogire în cele 32 de clase cristalografice

clasa	*Z* [001]	*X* [100]	*Y* [010]	α, β, γ	X_3	X_1	X_2	Alegerea sistemului de coordonate	Modificația dextrogiră
				Singonia triclinică					
1	sc_1	sc_2	sc_3	$\alpha > 90°$,	(001)	*b*(010)	⊥(010)	—	$d_{33} > 0$
$\bar{1}$	sc_1	sc_2	sc_3	$\beta > 90°$					
				Singonia monoclinică					
2	⊥ *Y* sc_1	⊥ *Y* sc_2	‖2	$\alpha = \gamma = 90°$,	[001]	⊥ (100)	[010]	—	$d_{22} > 0$
m	⊥ *Y* sc_1	⊥ *Y* sc_2	⊥*m*	$\beta > 90°$				$d_{33} > 0$	—
2/*m*	⊥ *Y* sc_1	⊥ *Y* sc_2	‖2						

Tabelul A.2 (continuare)

clasa	Z [001]	X [100]	Y [010]	α, β, γ	X_3	X_1	X_2	Alegerea sistemului de coordonate	Modificația dextrogiră
Singonia rombică									
222	∥2 sc_1	∥2 sc_2	∥2 sc_3						$d_{36} > 0$
$mm2$	∥2	⊥ m sc_1	⊥ msc_2	$\alpha = \beta = = \gamma = 90°$	[001]	[100]	[010]	$d_{33} > 0$	
mmm	∥2 sc_1	∥2 sc_2	∥2 sc_3						
Singonia tetragonală									
4	∥4	⊥ Z sc						$s_{16} > 0$	$d_{33} > 0$
$\bar{4}$	∥$\bar{4}$	⊥ Z sc						$s_{16} > 0$, $d_{36} > 0$	
$4/m$	∥4	⊥ Z sc						$s_{16} > 0$	
422	∥4	⊥ Z sc		$\alpha = \beta = = \gamma = 90°$	[001]	[100]	[010]		$d_{14} > 0$
$4mm$	∥4	⊥ Z sc						$d_{33} > 0$	
$\bar{4}2m$	∥$\bar{4}$	∥2						$d_{36} > 0$	
$4/mmm$	∥4	⊥ Z sc							
Singonia hexagonală									
3	∥3	⊥ Z sc						$s_{14} > 0$, $s_{25} > 0$	$d_{33} > 0$
$\bar{3}$	∥3	⊥ Z sc						$s_{14} > 0$, $s_{25} > 0$	
32	∥3	∥2						$s_{14} > 0$	$d_{11} > 0$
$3m$	∥3	⊥ m						$s_{14} > 0$, $d_{33} > 0$	
$\bar{3}m$	∥3	∥2						$s_{14} > 0$	
6	∥6	⊥ Z sc		$\alpha = \beta = = 90°$, $\gamma = 120°$	[0001]	[2$\bar{1}\bar{1}$0]	[01$\bar{1}$0]		$d_{33} > 0$
$\bar{6}$	∥$\bar{6}$	⊥ Z sc						$\pi_{16} > 0$, $d_{11} > 0$	
$6/m$	∥6	⊥ Z sc						$\pi_{16} > 0$	
622	∥6	⊥ Z sc							$d_{14} > 0$
$6mmm$	∥6	⊥ Z sc						$d_{33} > 0$	
$\bar{6}m2$	∥$\bar{6}$	⊥ m						$d_{22} > 0$	
$6/mmm$	∥6	⊥ Z sc							

Clasa	Z [001]	X [100]	Y [010]	α, β, γ	X_3	X_1	X_2	Alegerea sistemului de coordonate	Modificația dextrogiră
Singonia cubică									
23	$\parallel 2$			$\alpha=\beta=\gamma=90°$	[001]	[100]	[010]	$\pi_{12}>\pi_{13}$	$d_{14}>0$
$m3$	$\parallel 2$							$\pi_{12}>\pi_{13}$	
432	$\parallel 4$								$G>0$
$\bar{4}3m$	$\parallel \bar{4}$							$d_{14}>0$	
$m3m$	$\parallel 4$								
Modificări posibile									
2	$\parallel 2$	$\perp Z\ sc_1$	$\perp Z\ sc_2$	$\alpha=\beta=90°$, $\gamma>90°$	[001]	[100]	$\perp(010)$		$d_{33}>0$
m	$\perp m$	$\perp Z\ sc_1$	$\perp Z\ sc_2$					$d_{11}>0$	
$2/m$	$\parallel 2$	$\perp Y\ sc_1$	$\perp Z\ sc_2$						
$\bar{6}2m$	$\parallel \bar{6}$	$\parallel 2$		$\alpha=\beta=90°$, $\gamma=120°$	[0001]	$[2\bar{1}\bar{1}0]$	$[01\bar{1}0]$	$d_{11}>0$	

În secțiunea (din tabel) „Modificări posibile" este indicat modul în care se modifică regulile de alegere a axelor de coordonate și a modificațiilor enantiomorfe, dacă se ia o altă amplasare pentru cristalele din singonia monoclinică și clasa $\bar{6}m2$, care, în noua amplasare, este firesc să fie notată cu $\bar{6}2m$.

B. REȚELELE BRAVAIS ȘI MATRICELE CRISTALOGRAFICE

Subîmpărțirea rețelelor Bravais în rețele primitive și rețele centrate este, într-o anumită măsură, convențională. Aici se vor considera primitive acele șase rețele pe ai căror vectori ai bazei se construiesc, de regulă, sistemele de coordonate cristalografice.

Parametrii acestor reţele şi matricele lor cristalografice se determină cu ajutorul regulilor de alegere a sistemelor cristalografice de coordonate (v. anexa A). Celelalte opt reţele Bravais se consideră centrate; în particular, reţeaua rombică se consideră ca o reţea hexagonală centrată.

N o t a ţ i i l e:

a, b, c — lungimile vectorilor bazei reţelei cristaline;

α, β, γ — unghiurile dintre ele;

$v = abc\omega$ — volumul celulei elementare;

a^*, b^*, c^* — lungimile vectorilor bazei reţelei reciproce;

α^*, β^*, γ^* — unghiurile dintre ele;

ω — vezi mai jos;

$A = \|A_{\alpha i}\|$ — matricea dezvoltării bazei vectoriale $\boldsymbol{a}_\alpha$ a reţelei cristaline după versorii $\boldsymbol{e}_i$ ai sistemului de coordonate cristalofizic (indicii notaţi cu litere greceşti indexează şirurile, cei notaţi cu litere latine, coloanele);

$E = \|E_i^\alpha\|$ — matricea dezvoltării versorilor $\boldsymbol{e}_i$ ai sistemului de coordonate cristalofizic după vectorii bazei, $\boldsymbol{a}_\alpha$, ai reţelei cristaline (literele latine indexează şirurile, literele greceşti, coloanele);

$G = \|g_{\alpha\beta}\|$ — matricea componentelor covariante ale tensorului metric;

$G^{-1} = \|g^{\alpha\beta}\|$ — matricea componentelor contravariante ale tensorului metric;

$Q = \|Q_\alpha^{\beta'}\|$ — matricea dezvoltării bazei vectoriale a reţelei cristaline centrate după vectorul fundamental corespunzător reţelei primitive (indicii fără accent se referă la reţeaua centrată şi indică şirurile, cei cu accent se referă la reţeaua primitivă şi indică coloanele);

$P = \|P_{\alpha'}^{\beta}\|$ — matricea dezvoltării vectorului bazei reţelei cristaline primitive, în raport cu vectorul bazei reţelei centrate (indicii cu accent se referă la reţeaua primitivă şi indică şirurile, cei fără accent se referă la reţeaua necentrată şi indică coloanele);

Cîteva formule. Vom prezenta cele mai importante relaţii dintre parametrii reţelelor primitive Bravais, care facilitează utilizarea tabelului B.1.

Reţeaua triclinică primitivă, $P\bar{1}$

$$\omega = \sqrt{1 - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma},$$

$$a^* = \frac{\sin\alpha}{a\omega}, \quad b^* = \frac{\sin\beta}{b\omega}, \quad c^* = \frac{\sin\gamma}{c\omega},$$

$$\cos\alpha^* = \frac{\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha}{\sin\beta\sin\gamma}, \quad \cos\beta^* = \frac{\cos\gamma\cos\alpha - \cos\beta}{\sin\gamma\sin\alpha},$$

Tabelul B.1

Matricele A, E, G și G^{-1} pentru rețelele Bravais primitive

Rețeaua	A	E	G	G^{-1}
triclinică $P\bar{1}$	$\begin{matrix} a \sin\beta & 0 & a\cos\beta \\ -b\sin\alpha\cos\gamma^* & \frac{b\omega}{\sin\beta} & b\cos\alpha \\ 0 & 0 & c \end{matrix}$	$\begin{matrix} \frac{a^*\omega}{\sin\alpha\sin\beta} & 0 & -\frac{c^*\omega}{\mathrm{tg}\,\beta\sin\gamma} \\ a^*\cos\gamma^* & b^* & c^*\cos\alpha^* \\ 0 & 0 & \frac{c^*\omega}{\sin\gamma} \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^2 & ab\cos\gamma & ca\cos\beta \\ ab\cos\gamma & b^2 & bc\cos\alpha \\ ca\cos\beta & bc\cos\alpha & c^2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^{*2} & a^*b^*\cos\gamma^* & c^*a^*\cos b^* \\ a^*b^*\cos\gamma^* & b^{*2} & b^*c^*\cos\alpha^* \\ c^*a^*\cos\beta^* & b^*c^*\cos\alpha^* & c^{*2} \end{matrix}$
monoclinică $P2/m$	$\begin{matrix} a\sin\beta & 0 & a\cos\beta \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^* & 0 & -c^*\cos\beta \\ 0 & b^* & 0 \\ 0 & 0 & c^*\sin\beta \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^2 & 0 & ca\cos\beta \\ 0 & b^2 & 0 \\ ca\cos b & 0 & c^2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^{*2} & 0 & c^*a^*\cos\beta^* \\ 0 & b^{*2} & 0 \\ c^*a^*\cos\beta^* & 0 & c^{*2} \end{matrix}$
rombică $Pmmm$	$\begin{matrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^* & 0 & 0 \\ 0 & b^* & 0 \\ 0 & 0 & c^* \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & b^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^{*2} & 0 & 0 \\ 0 & b^{*2} & 0 \\ 0 & 0 & c^{*2} \end{matrix}$
tetragonală $P4/mmm$	$\begin{matrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^* & 0 & 0 \\ 0 & a^* & 0 \\ 0 & 0 & c^* \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^{*2} & 0 & 0 \\ 0 & a^{*2} & 0 \\ 0 & 0 & c^{*2} \end{matrix}$
hexagonală $P6/mmm$	$\begin{matrix} a & 0 & 0 \\ -\frac{a}{2} & \frac{a\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c \end{matrix}$	$\begin{matrix} \frac{a^*\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ \frac{a^*}{2} & a^* & 0 \\ 0 & 0 & c^* \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^2 & -\frac{a^2}{2} & 0 \\ -\frac{a^2}{2} & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^{*2} & \frac{a^{*2}}{2} & 0 \\ \frac{a^{2*}}{2} & a^{*2} & 0 \\ 0 & 0 & c^{*2} \end{matrix}$
cubică $Pm3m$	$\begin{matrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^* & 0 & 0 \\ 0 & a^* & 0 \\ 0 & 0 & a^* \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} a^{*2} & 0 & 0 \\ 0 & a^{*2} & 0 \\ 0 & 0 & a^{*2} \end{matrix}$

Tabelul B.2

Matricele G și G^{-1} pentru rețelele Bravais centrate

Rețeaua	G			G^{-1}		
	a^2	$a^2 \cos \gamma$	$ac \cos \alpha$	a^{*2}	$a^2 \cos \gamma^*$	$a^*c^* \cos \alpha^*$
$C2/m$	$a^2 \cos \gamma$	a^2	$ac \cos \alpha$	$a^{*2} \cos \gamma^*$	a^{*2}	$a^*c^* \cos \alpha^*$
	$ac \cos \alpha$	$ac \cos a$	c^2	$a^*c^* \cos \alpha^*$	$a^*c^* \cos \alpha^*$	c^{*2}
	a^2	$a^2 \cos \gamma$	0	a^{*2}	$a^{*2} \cos \gamma^*$	0
$Cmmm$	$a^2 \cos \gamma$	a^2	0	$a^{*2} \cos \gamma^*$	a^{*2}	0
	0	0	c^2	0	0	c^{*2}
	a^2	$\frac{a^2 + b^2 + c^2}{2}$	$\frac{a^2 - b^2 + c^2}{2}$	a^{*2}	$a^{*2} \cos \gamma^*$	$a^{*2} \cos \beta^*$
$Fmmm$	$\frac{a^2 + b^2 - c^2}{2}$	b^2	$\frac{-a^2 + b^2 + c^2}{2}$	$a^{*2} \cos \gamma^*$	a^{*2}	$a^{*2} \cos \alpha^*$
	$\frac{a^2 - b^2 + c^2}{2}$	$\frac{-a^2 + b^2 + c^2}{2}$	c^2	$a^{*2} \cos \beta^*$	$a^{*2} \cos \alpha^*$	a^{*2}
	a^2	$a^2 \cos \gamma$	$a^2 \cos \beta$	a^{*2}	$\frac{a^{*2} + b^{2*} - c^{2*}}{2}$	$\frac{a^{*2} - b^{*2} + c^{*2}}{2}$
$Immm$	$a^2 \cos \gamma$	a^2	$a^2 \cos \alpha$	$\frac{a^{*2} + b^{*2} - c^{*2}}{2}$	b^{*2}	$\frac{-a^{*2} + b^{*2} + c^{*2}}{2}$
	$a^2 \cos \beta$	$a^2 \cos \alpha$	a^2	$\frac{a^{*2} - b^{*2} + c^{*2}}{2}$	$\frac{-a^{*2} + b^{*2} + c^{*2}}{2}$	c^{*2}

Tabelul *B.2* (continuare)

Rețeaua	G			G^{-1}		
	a^2	$-a^2(1+2\cos\alpha)$	$a^2\cos\alpha$	a^{*2}	$\frac{2a^{*2}-c^{*2}}{2}$	$\frac{c^{*2}}{2}$
I4/mmm	$-a^2(1+2\cos\alpha)$	a^2	$a^2\cos\alpha$	$\frac{2a^{*2}-c^{*2}}{2}$	a^{*2}	$\frac{c^{*2}}{2}$
	$a^2\cos\alpha$	$a^2\cos\alpha$	a^2	$\frac{c^{*2}}{2}$	$\frac{c^{*2}}{2}$	c^{*2}
	a^2	$a^2\cos\alpha$	$a^2\cos\alpha$	a^{*2}	$a^{*2}\cos\alpha^*$	$a^{*2}\cos\alpha^*$
R$\bar{3}$m	$a^2\cos\alpha$	a^2	$a^2\cos\alpha$	$a^{*2}\cos\alpha^*$	a^{*2}	$a^{*2}\cos\alpha^*$
	$a^2\cos\alpha$	$a^2\cos\alpha$	a^2	$a^{*2}\cos\alpha^*$	$a^{*2}\cos\alpha^*$	a^{*2}
	a^2	$\frac{a^2}{2}$	$\frac{a^2}{2}$	a^{*2}	$-\frac{a^{*2}}{3}$	$-\frac{a^{*2}}{3}$
Fm3m	$\frac{a^2}{2}$	a^2	$\frac{a^2}{2}$	$-\frac{a^{*2}}{3}$	a^{*2}	$-\frac{a^{*2}}{3}$
	$\frac{a^2}{2}$	$\frac{a^2}{2}$	a^2	$-\frac{a^{*2}}{3}$	$-\frac{a^{*2}}{3}$	a^{*2}
	a^2	$-\frac{a^2}{3}$	$-\frac{a^2}{3}$	a^{*2}	$\frac{a^{*2}}{2}$	$\frac{a^{*}}{2}$
Im3m	$-\frac{a^2}{3}$	a^2	$-\frac{a^2}{3}$	$\frac{a^{*2}}{2}$	a^{*2}	$\frac{a^{*2}}{2}$
	$-\frac{a^2}{3}$	$-\frac{a^2}{3}$	a^2	$\frac{a^{*2}}{3}$	$\frac{a^{*2}}{2}$	a^{*2}

Tabelul B.3

Matricele Q și P, care leagă vectorii fundamentali ai rețelelor Bravais centrate, de bazele rețelelor primitive corespunzătoare

Rețelele	$C2/m$ $Cmmm$	$Fmmm$ $Fm3m$	$Immm$ $I4/mmm$ $Im3m$	$R\bar{3}m$
Q	$\begin{matrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 2/3 & 1/3 & 1/3 \\ -1/3 & 1/3 & 1/3 \\ -1/3 & -2/3 & 1/3 \end{matrix}$
P	$\begin{matrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{matrix}$

$$\cos\gamma^* = \frac{\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma}{\sin\alpha\sin\beta}.$$

Rețeaua monoclinică primitivă, $P2/m$,

$$\alpha = \gamma = 90°, \ \omega = \sin\beta,$$

$$a^* = 1/a\sin\beta, b^* = 1/b, c^* = 1/c\sin\beta, \alpha^* = \gamma^* = 90°, \beta^* = 180° - \beta.$$

Rețeaua rombică primitivă, $Pmmm$,

$$\alpha = \beta = \gamma = 90°, \ \omega = 1,$$

$$a^* = 1/a, \ b^* = 1/b, \ c^* = 1/c, \ \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90°.$$

Rețeaua tetragonală primitivă, $P4/mmm$

$$a = b, \alpha = \beta = \gamma = 90°, \omega = 1, \ a^* = b^* = 1/a, \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90°.$$

Rețeaua hexagonală primitivă, $P6/mmm$,

$$a = b, \ \alpha = \beta = 90°, \ \gamma = 120°, \ \omega = \sqrt{3}/2,$$

$$a^* = b^* = 2/(a/\sqrt{3}), \ c^* = 1/c, \ \alpha^* = \beta^* = 90°, \ \gamma^* = 60°.$$

Rețeaua cubică primitivă,

$$a = b = c, \ \alpha = \beta = \gamma = 90°, \ \omega = 1,$$

$$a^* = b^* = c^* = 1/a, \ \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90°.$$

După caracterul poziției lor față de elementele de simetrie ale cristalului, direcțiile dintr-un cristal se împart în direcții speciale și direcții nespeciale, polare și nepolare, axiale și neaxiale, elicoidale și neelicoidale (v. și Jeludev, 1971). Am utilizat aici termenul tradițional de „direcție", însă mai exact, în contextul dat, este vorba despre drepte.

O dreaptă se numește *nespecială* dacă toate operațiile de simetrie ale unui grup punctual al unui cristal o transformă în ea însăși.

Să asociem dreptei date un vector polar. Dacă cel puțin una dintre operațiile de simetrie ale grupului punctual al cristalului transformă această dreaptă în ea însăși, iar vectorul într-un vector opus, dreapta se numește dreaptă *nepolară*.

Să asociem dreptei un vector axial. Dacă cel puțin una dintre operațiile de simetrie ale grupului punctual transformă dreapta în ea însăși, iar vectorul axial într-un vector opus, dreapta se numește dreaptă *neaxială*.

Să legăm, în fine, de dreaptă, o elice. Dacă cel puțin una dintre operațiile grupului punctual de simetrie a cristalului transformă această dreaptă în ea însăși, iar șurubul într-un șurub de nume contrar, dreapta se numește dreaptă *neelicoidală*.

Definițiile corespunzătoare pot fi introduse și în alt mod, folosind grupurile limită Curie. Grupul de simetrie al unei drepte izolate este $G_{dr} = \infty/mm$, astfel încît axa ∞ coincide cu dreapta; însă grupul de simetrie al unei drepte dintr-un cristal, $G_{dr,cr}$, pe care îl vom numi pur și simplu grupul de simetrie al dreptei, reprezintă intersecția grupului punctual al cristalului, G_{cr} cu grupul G_{dr}

$$G_{dr,cr} = G_{cr} \cap G_{dr}.$$

O dreaptă se numește dreaptă *specială*, dacă grupul său de simetrie coincide cu grupul de simetrie al cristalului

$$G_{dr,cr} = G_{cr};$$

evident, pentru aceasta este necesar și suficient ca grupul de simetrie al cristalului să fie un subgrup al dreptei izolate (desigur, ținînd cont de poziția lor reciprocă)

$$G_{cr} \subset G_{dr} = \infty/mm.$$

Tabelul C.1

Direcțiile din cristale

Clasa	nepolare	neaxiale	neelicoidale	Speciale			
				polare	axiale	elicoidale	alte direcții
1	—	—	—	*hkl*	*hkl*	*hkl*	—
$\bar{1}$	*hkl*	—	*hkl*	—	*hkl*	—	—
2	*h*0*l*	*h*0*l*	—	010	010	010 *h*0*l*	—
m	010	*h*0*l*	010 *h*0*l*	*h*0*l*	010	—	—
2/*m*	*hkl*	*h*0*l*	*hkl*	—	010	—	*k*0*l*
222	0*hl* *h*0*l* *hk*0	0*hl* *h*0*l* *hk*0	—	—	—	100 010 001	—
*mm*2	*hk*0	0*kl* *h*0*l* *hk*0	0*kl* *h*0*l*	001	—	—	100 010
mmm	*hkl*	0*kl* *h*0*l* *hk*0	*hkl*	—	—	—	100 010 001
3	—	—	—	0001	0001	0001	—
$\bar{3}$	*hkil*	—	*hkil*	—	0001	—	—
32	0*kkl*	$0k\bar{k}l$	—	—	—	0001	—
3*m*	$2\bar{1}\bar{1}0$	$0k\bar{k}l$	$2\bar{1}\bar{1}0$ $0k\bar{k}l$	0001	—	—	—
$\bar{3}m$	*hkil*	$0k\bar{k}l$	*hkil*	—	—	—	0001
4	*hk*0	*hk*0	—	001	001	001	—
$\bar{4}$	*hk*0 001	*hk*0	001	—	001	—	—
4/*m*	*hkl*	*hk*0	*hkl*	—	001	—	—
422	*hk*0 0*kl* *hhl*	*hk*0 0*kl* *hhl*	—	—	—	001	—

Clasa	nepolare	neaxiale	neelicoidale	Speciale			
				polare	axiale	elicoidale	alte direcţii
$4mm$	$hk0$	$hk0$ $0kl$ hhl	$0kl$ hhl	001	—	—	—
$\bar{4}2m$	$hk0$ $0kl$	$hk0$ $0kl$ hhl	hhl	—	—	—	001
$4/mmm$	hkl	$hk0$ $0kl$ hhl	hkl	—	—	—	001
6	$hkt0$	$hki0$	—	0001	0001	0001	—
$\bar{6}$	hk_i0 0001	$hki0$	$hki0$ 0001	—	0001	—	—
$6/m$	$hkil$	$hki0$	$hkil$	—	0001	—	—
622	$hki0$ $0k\bar{k}l$ $hkkl$	$hki0$ $0k\bar{k}l$ $hkkl$	—	—	—	0001	—
$6mm$	$hki0$	$hki0$ $0k\bar{k}l$ $hkkl$	$0k\overline{kl}$ $hkkl$	0001	—	—	—
$\bar{6}m2$	$hki0$ $hkkl$	$hki0$ $0k\bar{k}l$ $hkkl$	$hki0$ $0k\bar{k}l$	—	—	—	0001
$6/mmm$	$kkil$	$hki0$ $0k\bar{k}l$ $hkkl$	$hkil$	—	—	—	0001
23	$0kl$	$0kl$	—	—	—	—	—
$m3$	hkl	$0kl$	hkl				
432	$0kl$ hhl	$0kl$ hhl	—	—	—	—	—
$\bar{4}3m$	$0kl$	$0kl$ hhl	hhl	—	—	—	—
$m3m$	hkl	$0kl$ hhl	hkl	—	—	—	—

Direcţiile din mediile de simetrie limită

Grupul Curie	Nepolare	Neaxiale	Neelicoidale	Speciale			
				polare	axiale	elicoidale	alte direcţii
∞	$\perp k$	$\perp k$	nu au	k	k	k	nu au
∞/m	toate	$\perp k$	toate	nu au	k	nu au	nu au
$\infty 2$	toate	toate	nu au	nu au	nu au	k	nu au
∞m	$\perp k$	toate	toate	k	nu au	nu au	nu au
∞/mm	toate	toate	toate	nu au	nu au	nu au	k
$\infty\infty$	toate	toate	nu au	nu au	nu au	nu au	nu au
$\infty\infty m$	toate	toate	toate	nu au	nu au	nu au	nu au

Observaţie. Vectorul k este orientat după axa principală de simetrie.

De aici rezultă direct că drepte speciale există în acele şi numai în acele cristale ale căror grupuri punctuale sînt subgrupuri limită ∞/mm; asemenea cristale sînt cristalele din categoria inferioară şi din cea medie.

O dreaptă se numeşte dreaptă *polară*, dacă grupul ei de simetrie este subgrup al grupului polar

$$G_{dr,cr} \subset \infty m.$$

Ea se numeşte *axială*, dacă grupul său de simetrie este un subgrup al vectorului axial

$$G_{dr,cr} \subset \infty/m.$$

În fine, ea se numeşte dreaptă *elicoidală*, dacă grupul ei de simetrie este un subgrup al grupului elicei

$$G_{dr,cr} \subset \infty 2.$$

Caracteristicile enumerate ale direcţiilor (revenim la denumirea tradiţională) sînt importante pentru fizica cristalelor. Astfel, un vector propriu izolat (adică un vector care nu este cuprins nici în planul, nici în spaţiul vectorilor proprii) al unui tensor simetric de material de rangul doi coincide totdeauna cu una dintre direcţiile speciale ale cristalului. Pot fi cristale piroelectrice numai acele cristale care au cel puţin o singură direcţie polară specială; numai această direcţie poate servi drept direcţie a vectorilor polarizării spontane, inducţiei electrice spontane şi coeficienţilor piroelectrici. Direcţie de polarizare piroelectrică poate

fi numai o direcţie polară. În fine, dubla refracţie circulară sau eliptică de tip elicoidal poate fi numai în direcţii elicoidale (posibilitatea dublei refracţii de tip axial este determinată de simetria magnetică a unei direcţii ; v. § 82).

Direcţiile polară, axială şi elicoidală sînt date în figura 44.1. Caracteristicile tuturor fasciculelor posibile de direcţii simetric echivalente, pentru toate cele 32 de clase de simetrie ale cristalelor sînt date în tabelul C.1. Fasciculele de direcţii simetric echivalente din cristalele singoniei hexagonale (sistemele trigonal şi hexagonal) se caracterizează prin indici Bravais, iar în cristalele celorlalte clase, prin indici Miller. Aranjarea este cea standard (v. anexa A). În tabelul C.2 sînt date proprietăţile direcţiilor din mediile cu simetrie limită.

D. DEMONSTRAŢIA ANALITICĂ A TEOREMELOR ÎNMULŢIRII OPERAŢIILOR DE SIMETRIE

Teoremele înmulţirii operaţiilor de simetrie, date în § 3, sînt uşor de demonstrat analitic, aplicînd înmulţirea matricelor corespunzătoare; metoda de construire a acestor matrice este dată în § 17, ele însele fiind descrise în tabelul 17.1.

D e m o n s t r a ţ i a   t e o r e m e i   1. Fără a restrînge generalitatea, se poate considera că unul dintre planurile care se intersectează este normal la vectorul bazei, e_1, iar vectorul unitar al normalei celui de al doilea este egal cu $e_1 \cos\psi + e_2 \sin\psi$ (ψ fiind unghiul dintre planuri). Să le transcriem din tabel şi să înmulţim matricele corespunzătoare

$$\begin{Vmatrix} -\cos 2\psi & -\sin 2\psi & 0 \\ -\sin 2\psi & \cos 2\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix} \begin{Vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix} = \begin{Vmatrix} \cos 2\psi & -\sin 2\psi & 0 \\ \sin 2\psi & \cos 2\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}.$$

Rezultatul: matricea este rotită în jurul vectorului e_3 (adică a liniei de intersecţie a planurilor) cu dublul unghiului dintre planuri).

D e m o n s t r a ţ i a   t e o r e m e i   2. Înmulţind matricea rotaţiei în jurul axei 2 cu reflexia într-un plan perpendicular la ea (2_z şi m_z)

$$\begin{Vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix} \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix} = \begin{Vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix},$$

obţinem matricea de inversie. Analog se demonstrează toate celelalte teoreme.

E. TENSORII INVARIANȚI FAȚĂ DE GRUPURILE CRISTALOGRAFICE ȘI FAȚĂ DE GRUPURILE LIMITĂ

În tabelele acestei anexe sînt dați tensorii și pseudotensorii de diverse simetrii interne (simetria internă este dată în titlurile tabelelor prin simbolurile lui Jahn — v. § 42), invariante față de toate grupurile cristalografice și de grupurile limită posibile; numai în ultimele trei tabele, pentru a economisi spațiu, sînt dați tensorii de rangul cinci și de rangul șase numai pentru cîteva clase (tabele mai complete — pînă la rangul opt inclusiv — a întocmit Smith, 1970). Pentru toți tensorii este dat numărul de componente independente ale lor și numărul de invarianți independenți (cînd se dă numai numărul de componente, aceasta înseamnă că numărul de invarianți independenți este același). Tensorii (și pseudotensorii), invarianți față de grupurile cristalografice și față de grupurile limită date se utilizează în fizica cristalelor ca tensori de material ai cristalelor și texturilor care se referă la clasele cristalografice și clasele limită respective. Mai jos sînt enumerate aplicațiile în cadrul fizicii cristalelor ale tensorilor dați în această anexă.

Numărul tabelului	Simetria internă	Aplicații
E.1	ε	Enantiomorfismul ρ: pentru cristale dextrogire, $\rho = 1$, pentru levogire, $\rho = -1$, pentru neenantiomorfe $\rho = 0$ (§ 5); rotația specifică a planului de polarizare, α, pentru substanțele optic izotrope (§ 81).
E.2	V	Vectorii coeficienților piroelectrici, $\boldsymbol{p}$ (§ 31), polarizare spontană, $\boldsymbol{P}^{(0)}$, și inducție spontană, $\boldsymbol{D}^{(0)}$(§§ 26, 65), polarizare piezoelectrică sub acțiunea presiunii hidrostatice, $\boldsymbol{d} = \mathbf{d} : \mathbf{I}$ (§ 58).
E.3	εV	Vectorii axiali, duali tensorilor $\{V^2\}$ (v. tab. E.5). Se pare că se pot utiliza ca tensori de material independenți. Cu mult înainte s-a presupus că vectorul coeficienților piromagnetici este de acest fel, însă după descoperirea simetriei magnetice a cristalelor s-a dovedit că aceasta este o eroare.
E.4	$[V^2]$	Tensorii deformării spontane, $\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)}$ (§ 65), susceptibilității dielectrice, $\boldsymbol{\alpha}$, permitivității, $\boldsymbol{\varkappa}$ și impermitivității, $\boldsymbol{\eta}$ (§§ 26, 27), susceptibilității magnetice $\boldsymbol{\mu}$ (§ 73), dilatării termice, $\boldsymbol{\alpha}$, și termoelasticității $\boldsymbol{\beta}$ (§§ 51, 52) precum și mulți alții; în plus, tensorii conductibilității electrice, $\boldsymbol{\sigma}$, rezistivității $\boldsymbol{\rho}$, conductibilității termice, $\boldsymbol{\lambda}$, și difuzibilității, $\mathbf{k}$, pentru clasele nemagnetice (§§ 32, 33, 76).

(continuare)

Numărul tabelului	Simetria internă	Aplicații
E.5	$\{V^2\}$	Părțile antisimetrice ale tensorilor de tipul V^2 (tab. E.6), ca tensori de material considerați separat se pare că nu se utilizează practic.
E.6	V^2	Tensorii coeficienților Faraday, **F** (§ 82), coeficienților termoelectrici, α și γ (§ 76), tensorii coeficienților Hall, **R**, și Leduc-Righi, **L**, în cristalele nemagnetice (§ 76) și tensorii conductibilității electrice, σ, rezistivității, ρ, și conductibilității termice, λ, în cristalele magnetice.
E.7	$\varepsilon[V^2]$	Pseudotensorul simetric al coeficienților de girație, **G** (§§ 81, 82).
E.8	$\varepsilon\{V^2\}$	Partea antisimetrică din întregul pseudotensor de girație; reprezintă numai activitatea optică „slabă" (§ 81).
E.9	εV^2	Pseudotensorul (nesimetric) întreg al coeficienților de girație: pe lîngă activitatea optică obișnuită („intensă") descrie și pe cea „slabă" (§ 81).
E.10	$[V^3]$	Tensorul efectului piezoelectric longitudinal, **f** (§ 58); tensorul susceptibilității dielectrice pătratice, χ (2ω, ω, ω) cînd se neglijează dispersia (§§ 79, 80).
E.11	$V[V^2]$	Tensorii coeficienților piezoelectrici **d** și **e** (§§ 58, 60, 61), coeficienților efectului electrooptic, **r** (§77), coeficienților susceptibilității pătratice, χ (2ω, ω, ω) și χ (0, ω, ω) (§ 79).
E.12	$\{V^2\}V$	Tensorul de material γ, care caracterizează dispersia spațială de ordinul întîi (§ 81).
E.13	V^3	Tensorul susceptibilității pătratice, χ ($\omega_1 \pm \omega_2$, ω_1, ω_2) pentru $\omega_1 \neq \omega_2$ și ținînd cont de dispersie (§ 79).
E.14	$\varepsilon V[V^2]$	Pseudotensorul de electrogirație, **A**, care definește variația pseudotensorului simetric al girației, sub acțiunea cîmpului electric (§ 82). Înainte, se considera, în mod eronat, că tot așa sînt și coeficienții piezomagnetici (de comparat cu aplicațiile în fizica cristalelor ale vectorului axial — E.3).
E.15	εV^3	Pseudotensorul coeficienților Nernst și Ettingshausen, **N** și **M** (§ 76); pseudotensorii coeficienților Hall, **P**, și Leduc-Righi, **Q**, în cristalele magnetice (§ 76).
E.16	$[V^4]$	Tensorul susceptibilității cubice, θ (3ω, ω, ω, ω) cînd se neglijează dispersia (§ 79).

(continuare)

Numărul tabelului	Simetria internă	Aplicații
E.17	$V[V^3]$	Tensorul susceptibilității cubice θ $(3\omega, \omega, \omega, \omega)$ (§ 79).
E.18	$[[V^2]^2]$	Tensorul coeficienților de elasticitate, **c**, și de deformabilitate elastică, **s** (§§ 51, 52).
E.19	$[V^2]^2$	Tensorii coeficienților de electrostricțiune, **P** (§ 74), de magnetostricțiune, de elastorezistență, **m**, și de piezorezistență, **Π** (§75), coeficienților elastooptici, **p**, piezooptici, **π** (§ 77), coeficienților Kerr, **K** (§§ 77, 79) și Cotton-Mouton **C** (§ 82).
E.20	$[(V^2)^2]$	Tensorii coeficienților elastici în cadrul teoriilor nesimetrice ale elasticității.
E.21	$[V^2]V^2$	Tensorul susceptibilității cubice, θ $(2\omega, 0, \omega, \omega)$ descrie generarea armonicei de ordinul doi al radiației electromagnetice în cristalele cu centru de simetrie, supuse cîmpului electric (§§ 79, 80).
E.22	V^4	Tensorul general al susceptibilității cubice, θ $(\omega, \omega_1, \omega_2, \omega_3)$ (§ 79).
E.23	$V[[V^2]^2]$	Tensorul efectului piezoelectric pătratic, **Q**, tensorul efectului cîmpului magnetic asupra constantelor elastice etc. (§ 74).
E.24	$[[V^2]^3]$	Coeficienții pătratici ai elasticității, **C**, și ai deformabilității elastice, **L** (§ 74).
E.25	$[V^2][[V^2]^2]$	Coeficienții efectului tensiunii statice sau a deformării statice asupra constantelor elastice dinamice (§ 74), ai efectului piezooptic pătratic etc.

Tabelul E.1

ε — pseudoscalarul ρ

Clasele	ρ
1, 2, 222, 3, 32, 4, 422, 6, 622, 23, 432, ∞, ∞2, ∞∞	ρ
$\bar{1}$, m, $2/m$, $mm2$, mmm, $\bar{3}$, $3m$, $\bar{3}m$, $\bar{4}$, $4/m$, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$, $\bar{6}$, $6/m$, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, $m3$, $\bar{4}3m$, $m3m$, ∞/m, ∞m, ∞/mm, $\infty\infty m$	0

Tabelul E.2

V — vectorul $\boldsymbol{p}$

Clasele	p_i	Clasele	p_i
1—3 comp., 1 inv. *	$p_1\ p_2\ p_3$	$2(2 \parallel X_2)$ — 1 comp.	$0\ p_2\ 0$
$m(m \perp X_2)$ — 2 comp., 1 inv.	$p_1\ 0\ p_3$	$2(2 \parallel X_3)$, $mm2$, 3, $3m$, 4, $4mm$, 6, $6mm$, ∞, ∞m — 1 comp.	$0\ 0\ p_3$
$m(m \perp X_3)$ — 2 comp., 1 inv.	$p_1\ p_2\ 0$		

* „3 comp., 1 inv." înseamnă că tensorul de material din clasa dată are 3 componente independente și 1 invariant independent. Aceste prescurtări se utilizează în toate tabelele din această anexă. Cînd este dat numai numărul de componente independente, înseamnă că numărul de invarianți este același cu numărul de componente.

În clasele $\bar{1}$, $2/m$, 222, mmm, $\bar{3}$, 32, $\bar{3}m$, $\bar{4}$, $4/m$, 422, $\bar{4}2m$, $4/mmm$, $\bar{6}$, $6/m$, 622, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, 23, $m3$, 432, $\bar{4}3m$, $m3m$, ∞/m, $\infty 2$, ∞/mm, $\infty\infty$, $\infty\infty m$, $\boldsymbol{p} = 0$.

Tabelul E.3

εV — vectorul axial $\mathring{a}$

Clasele	a_i
1, $\bar{1}$ — 3 comp., 1 inv.	$a_1\ a_2\ a_3$
2, m, $2/m$ $(2 \parallel X_2, m \perp X_2)$ — 1 comp.	$0\ a_2\ 0$
2, m, $2/m(2 \parallel X_3, m \perp X_3)$, 3, $\bar{3}$, 4, $\bar{4}$, $4/m$, 6, $\bar{6}$, $6/m$, ∞, ∞/m — 1 comp.	$0\ 0\ a_3$

În clasele 222, $mm2$, mmm, 32, $3m$, $\bar{3}m$, 422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, 23, $m3$, 432, $\bar{4}3m$, $m3m$, $\infty 2$, ∞m, ∞/mm, $\infty\infty$, $\infty\infty m$, $\mathring{a} = 0$.

Tabelul E.4

$[V^2]$ — tensorul simetric de rangul doi, S; $S_{ij} = S_{ji}$

Clasele	S_{ij}	Clasele	S_{ij}
1, $\bar{1}$ 6 comp., 3 inv.	$S_{11}\ S_{12}\ S_{31}$ / $S_{22}\ S_{23}$ / S_{33}	222, $mm2$, mmm 3 comp.	$S_{11}\ 0\ 0$ / $S_{22}\ 0$ / S_{33}
2, m, $2/m$ $(2 \parallel X_2, m \perp X_2)$ 4 comp., 3 inv.	$S_{11}\ 0\ S_{31}$ / $S_{22}\ 0$ / S_{33}	3, $\bar{3}$, 32, $3m$, $\bar{3}m$, 4, $\bar{4}$, $4/m$, 422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$, 6, $\bar{6}$, $6/m$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, ∞, ∞/m, $\infty 2$, ∞m, ∞/mm — 2 comp.	$S_{11}\ 0\ 0$ / $S_{11}\ 0$ / S_{33}
2, m, $2/m$ $(2 \parallel X_3, m \perp X_3)$ 4 comp., 3 inv.	$S_{11}\ S_{12}\ 0$ / $S_{22}\ 0$ / S_{33}	23, $m3$, 432, $\bar{4}3m$, $m3m$, $\infty\infty$, $\infty\infty m$, 1 comp.	$S_{11}\ 0\ 0$ / $S_{11}\ 0$ / S_{11}

Tabelul E.5

$[V^2]$ — tensorul antisimetric de rangul doi, A ; $A_{ji} = A_{ij}$

Clasele	A_{ij}	Clasele	A_{ij}
1, $\bar{1}$ 3 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} 0 & A_{12} & -A_{31} \\ -A_{12} & 0 & A_{23} \\ A_{31} & -A_{23} & 0 \end{matrix}$	2, m, $2/m$ ($2 \parallel X_3$, $m \perp X_3$), 3, $\bar{3}$, 4, $\bar{4}$, $4/m$, 6, $\bar{6}$, $6/m$ ∞, ∞/m 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & A_{12} & 0 \\ -A_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
2, m, $2/m$ ($2 \parallel X_2$, $m \perp X_2$) 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & -A_{31} \\ 0 & 0 & 0 \\ A_{31} & 0 & 0 \end{matrix}$		

În clasele 222, $mm2$, mmm, 32, $3m$, $\bar{3}m$, 422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, 23, $m3$, 432, $\bar{4}3m$, $m3m$, $\infty 2$, ∞m, ∞/mm, $\infty \infty \infty \infty m$ $A = 0$.

Tabelul E.6

V^2 — tensorul de rangul doi, T

Clasele	T_{ij}	Clasele	T_{ij}
1, $\bar{1}$ 9 comp., 6 inv.	$\begin{matrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{matrix}$	3, $\bar{3}$, 4, $\bar{4}$, $4/m$, 6, $\bar{6}$, $6/m$, ∞, ∞/m 3 comp.	$\begin{matrix} T_{11} & T_{12} & 0 \\ -T_{12} & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{matrix}$
2, m, $2/m$ ($2 \parallel X_2$, $m \perp X_2$) 5 comp., 4 inv.	$\begin{matrix} T_{11} & 0 & T_{13} \\ 0 & T_{22} & 0 \\ T_{31} & 0 & T_{33} \end{matrix}$	32, $3m$, $\bar{3}m$, 422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, $\infty 2$, ∞m; ∞/mm — 2 comp.	$\begin{matrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{matrix}$
2, m, $2/m$ ($2 \parallel X_3$, $m \perp X_3$) 5 comp., 4 inv.	$\begin{matrix} T_{11} & T_{12} & 0 \\ T_{21} & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{matrix}$		
222, $mm2$, mmm 3 comp.	$\begin{matrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{matrix}$	23, $m3$, 432, $\bar{4}3m$ $m3m$, $\infty\infty$, $\infty\infty m$ 1 comp.	$\begin{matrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{11} \end{matrix}$

Tabelul E.7

ε $[V^2]$ — pseudotensorul simetric de rangul doi, G ; $G_{ji} = G_{ij}$

Clasa	G_{ij}	Clasa	G_{ij}	Clasa	G_{ij}
1 6 comp., 3 inv.	$\begin{matrix} G_{11} & G_{12} & G_{31} \\ & G_{22} & G_{23} \\ & & G_{33} \end{matrix}$	m ($m \perp X_3$) 2 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} 0 & 0 & G_{31} \\ & 0 & G_{23} \\ & & 0 \end{matrix}$	$\bar{4}2m$ 1 comp.	$\begin{matrix} G_{11} & 0 & 0 \\ & -G_{11} & 0 \\ & & 0 \end{matrix}$
2 ($2 \parallel X_2$) 4 comp., 3 inv.	$\begin{matrix} G_{11} & 0 & G_{31} \\ & G_{22} & 0 \\ & & G_{33} \end{matrix}$	222 3 comp.	$\begin{matrix} G_{11} & 0 & 0 \\ & G_{22} & 0 \\ & & G_{33} \end{matrix}$	3 32, 4 422, 6, 622, ∞, $\infty 2$ 2 comp.	$\begin{matrix} G_{11} & 0 & 0 \\ & G_{11} & 0 \\ & & G_{33} \end{matrix}$
2 ($2 \parallel X_3$) 4 comp., 3 inv.	$\begin{matrix} G_{11} & G_{12} & 0 \\ & G_{22} & 0 \\ & & G_{33} \end{matrix}$	$mm2$, $\bar{4}m2$ ($m \perp X_1, X_2$) 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & G_{12} & 0 \\ & 0 & 0 \\ & & 0 \end{matrix}$	23, 432, $\infty\infty$ 1 comp.	$\begin{matrix} G_{11} & 0 & 0 \\ & G_{11} & 0 \\ & & G_{11} \end{matrix}$
m ($m \perp X_2$) 2 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} 0 & G_{12} & 0 \\ & 0 & G_{23} \\ & & 0 \end{matrix}$	$\bar{4}$ 2 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} G_{11} & G_{12} & 0 \\ & -G_{11} & 0 \\ & & 0 \end{matrix}$		

În clasele $\bar{1}$, $2/m$, mmm, $\bar{3}$, $3m$, $\bar{3}m$, $4/m$, $4mm$, $\bar{6}$, $6/m$, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, $m3$, $\bar{4}3m$, $m3m$, ∞/m, ∞m, ∞/mm, $\infty\infty m$ G = 0.

Tabelul E.8

$\varepsilon[V^2]$ — pseudotensorul antisimetric de rangul doi, B; $-B_{ji} = B_{ij}$

Clasele	B_{ij}	Clasele	B_{ij}
1 3 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} 0 & B_{12} & -B_{31} \\ -B_{12} & 0 & B_{23} \\ B_{31} & -B_{23} & 0 \end{matrix}$	m ($m \perp X_3$) 2 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} 0 & 0 & -B_{31} \\ 0 & 0 & B_{23} \\ B_{31} & -B_{23} & 0 \end{matrix}$
2 (2 ∥ X_2) 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & -B_{31} \\ 0 & 0 & 0 \\ B_{31} & 0 & 0 \end{matrix}$	2 (2 ∥ X_3), $mm2$, 3, $3m$ 4, $4mm$, 6, $6mm$ ∞, ∞m 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & B_{12} & 0 \\ -B_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
m ($m \perp X_2$) 2 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} 0 & B_{12} & 0 \\ -B_{12} & 0 & B_{23} \\ 0 & -B_{23} & 0 \end{matrix}$		

În clasele $\bar{1}$, $2/m$, 222, mmm, $\bar{3}$, 32, $\bar{3}m$, $\bar{4}$, $4/m$, 422, $\bar{4}2m$, $4/mmm$, $\bar{6}$, $6/m$, 622, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, 23, $m3$, 432, $\bar{4}3m$, $m3m$, ∞/m, $\infty 2$, ∞/mm, $\infty\infty$, $\infty\infty m$ **B** = 0.

Tabelul E.9

εV^2 — pseudotensorul de rangul doi, D

Clasele	D_{ij}	Clasele	D_{ij}	Clasele	D_{ij}
1 9 comp., 6 inv.	$\begin{matrix} D_{11} & D_{12} & D_{31} \\ D_{21} & D_{22} & D_{32} \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} \end{matrix}$	222 3 comp.	$\begin{matrix} D_{11} & 0 & 0 \\ 0 & D_{22} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{matrix}$	3, 4, 6, ∞ 3 comp.	$\begin{matrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ -D_{12} & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{matrix}$
2 (2 ∥ X_3) 5 comp., 4 inv.	$\begin{matrix} D_{11} & 0 & D_{13} \\ 0 & D_{22} & 0 \\ D_{31} & 0 & D_{33} \end{matrix}$	$mm2$ 2 comp.	$\begin{matrix} 0 & D_{12} & 0 \\ D_{21} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$	32, 422 622, ∞2 2 comp.	$\begin{matrix} D_{11} & 0 & 0 \\ 0 & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{matrix}$
2 (2 ∥ X_3) 5 comp., 4 inv.	$\begin{matrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ D_{21} & D_{22} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{matrix}$	4 2 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ D_{12} & -D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$	$3m$, $4mm$ $6mm$, ∞m 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & D_{12} & 0 \\ -D_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
m ($m \perp X_2$) 4 comp., 3 inv.	$\begin{matrix} 0 & D_{12} & 0 \\ D_{21} & 0 & D_{23} \\ 0 & D_{32} & 0 \end{matrix}$	$\bar{4}2m$ 1 comp.	$\begin{matrix} D_{11} & 0 & 0 \\ 0 & -D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$	23 432, ∞∞ 1 comp.	$\begin{matrix} D_{11} & 0 & 0 \\ 0 & D_{11} & 0 \\ 0 & 0 & D_{11} \end{matrix}$
m ($m \perp X_3$) 4 comp., 3 inv.	$\begin{matrix} 0 & 0 & D_{13} \\ 0 & 0 & D_{23} \\ D_{31} & D_{32} & 0 \end{matrix}$				

În clasele $\bar{1}$, $2/m$, mmm, $\bar{3}$, $\bar{3}m$, $4/m$, $4/mmm$, $\bar{6}$, $6/m$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, $m3$, $\bar{4}3m$, $m3m$, ∞/m, ∞/mm, $\infty\infty m$ **D** = 0

$[V^3]$ — tensorul de rangul trei, f, simetric în raport cu toţi indicii

Clasele	f_{ijk}	Clasele	f_{ijk}	Clasele	f_{ijk}
1 10 comp., 7 inv.	f_{111} f_{122} f_{133} f_{123} f_{211} f_{222} f_{233} f_{311} f_{322} f_{333}	*mm*2 3 comp.	0 0 0 0 0 0 0 f_{311} f_{322} f_{333}	4, 6, ∞, 4*mm*, 6*mm*, ∞*m* 2 comp.	0 0 0 0 0 0 0 f_{311} f_{311} f_{333}
2 $(2 \parallel X_2)$ 4 comp., 3 inv.	0 0 0 f_{123} f_{211} f_{222} f_{233} 0 0 0	*mm*2 $(\subset \bar{4}2m)$ 3 comp.	0 0 0 f_{123} 0 0 0 f_{311} f_{311} f_{333}	$\bar{4}$ 2 com., 1 inv.	0 0 0 f_{123} 0 0 0 f_{311} $-f_{311}$ 0
2 $(2 \parallel X_3)$ 4 comp., 3 inv.	0 0 0 f_{123} 0 0 0 f_{311} f_{322} f_{333}	3 4 comp., 3 inv.	f_{111} $-f_{111}$ 0 0 $-f_{222}$ f_{222} 0 f_{311} f_{311} f_{333}	$\bar{4}m2$ $(m \perp X_1)$ 1 comp.	0 0 0 0 0 0 0 f_{311} $-f_{311}$ 0
m $(m \perp X_2)$ 6 comp., 6 inv.	f_{111} f_{122} f_{133} 0 0 0 0 f_{311} f_{322} f_{333}	32, $\bar{6}2m$ $(2 \parallel X_1)$ 1 comp.	f_{111} $-f_{111}$ 0 0 0 0 0 0 0 0	$\bar{6}$ 2 comp., 1 inv.	f_{111} $-f_{111}$ 0 0 $-f_{222}$ f_{222} 0 0 0 0
m $(m \perp X_3)$ 6 comp., 5 inv.	f_{111} f_{122} f_{133} 0 f_{211} f_{222} f_{233} 0 0 0	3*m* $(m \perp X_1)$ 3 comp.	0 0 0 0 $-f_{222}$ f_{222} 0 f_{311} f_{311} f_{333}	$\bar{6}m2$ $(m \perp X_1)$ 32 $(2 \parallel X_2)$ 1 comp.	0 0 0 0 $-f_{222}$ f_{222} 0 0 0 0
222, $\bar{4}2m$ 23 $\bar{4}3m$ 1 comp.	0 0 0 f_{123} 0 0 0 0 0 0	3*m* $(m \perp X_2)$ 3 comp.	f_{111} $-f_{111}$ 0 0 0 0 0 f_{311} f_{311} f_{333}		

În clasele $\bar{1}$, 2/*m*, *mmm*, $\bar{3}$, $\bar{3}m$, 4/*m*, 422, 4/*mmm*, 6/*m*, 622, 6/*mmm*, *m*3, 432, *m*3*m*, ∞/*m*, ∞2, ∞*mm*, ∞∞, ∞∞*m* f = 0.

Tabelul E.11

$V\ [V^2]$ — tensorul de rangul trei, e ($e_{ilk} = e_{ikl}$), simetric în raport cu doi indici

Sînt transcriși coeficienții $e_{i\mu}$, legați de componentele e_{ikl} prin regulile de recalculare (v. anexa F)

$$e_{i\mu} = e_{ikl} \qquad (kl \longleftrightarrow \mu = 1, \ldots, 6)$$

În cazurile în care pentru coeficienții $d_{i\mu}$, care sînt legați de componentele tensorului d_{ikl} prin regulile de recalculare

$$d_{i\mu} = \begin{cases} d_{ikl} & (kl \longleftrightarrow \mu = 1,\ 2,\ 3), \\ 2d_{ikl} & (kl \longleftrightarrow \mu = 4,\ 5,\ 6), \end{cases}$$

tabelele coeficienților au altă formă, fiind și ei transcriși.

Clasele	$e_{i\mu}$ și $d_{i\mu}$
1 18 comp., 15 inv.	$\begin{matrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} & e_{14} & e_{15} & e_{16} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} & e_{24} & e_{25} & e_{26} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & e_{34} & e_{35} & e_{36} \end{matrix}$
2 ($2 \parallel X_2$) 8 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & e_{16} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} & 0 & e_{25} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{34} & 0 & e_{36} \end{matrix}$
2 ($2 \parallel X_3$) 8 comp., 7 inv.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{24} & e_{25} & 0 \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & 0 & 0 & e_{36} \end{matrix}$
m ($m \perp X_2$) 10 comp., 9 inv.	$\begin{matrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{24} & 0 & e_{26} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & 0 & e_{35} & 0 \end{matrix}$
m ($m \perp X_3$) 10 comp., 9 inv.	$\begin{matrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} & 0 & 0 & e_{16} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} & 0 & 0 & e_{26} \\ 0 & 0 & 0 & e_{34} & e_{35} & 0 \end{matrix}$
222 3 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e_{25} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{36} \end{matrix}$
$mm2$ 5 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{24} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$

Clasele	$e_{i\mu}$ și $d_{i\mu}$
$mm2$ ($\subset \bar{4}2m$) 5 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & e_{14} & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & e_{36} \end{matrix}$
3 6 comp., 5 inv.	$\begin{matrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & e_{14} & e_{15} & -e_{22} \\ -e_{22} & e_{22} & 0 & e_{15} & -e_{14} & -e_{11} \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$ $\begin{matrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & d_{14} & d_{15} & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & d_{15} & -d_{14} & -2d_{11} \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
32 ($2 \parallel X_1$) 2 comp.	$\begin{matrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{14} & -e_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$ $\begin{matrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -d_{14} & -2d_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
32 ($2 \parallel X_2$) 2 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & -e_{22} \\ -e_{22} & e_{22} & 0 & 0 & -e_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$ $\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & 0 & -d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$

Clasele	$e_{i\mu}$ și $d_{i\mu}$
$3m$ $(m\perp X_1)$ comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & -e_{22} \\ -e_{22} & e_{22} & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
$3m$ $(m\perp X_2)$ comp.	$\begin{matrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & -e_{11} \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
	$\begin{matrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & -2d_{11} \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
$4, 6, \infty$ comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & -e_{14} & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
$422, 622, \infty 2$ 1 comp	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
$4mm$ $6mm,$ ∞m 3 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
$\bar{4}$ 4 comp., 3 inv.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -e_{15} & e_{14} & 0 \\ e_{31} & -e_{31} & 0 & 0 & 0 & e_{36} \end{matrix}$
$\bar{4}2m$ $(2 \parallel X_1)$ 2 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{36} \end{matrix}$
$\bar{4}m2$ $(m\perp X_1)$ 2 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & -e_{31} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
$\bar{6}$ 2 comp., 1 inv.	$\begin{matrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & 0 & 0 & -e_{22} \\ -e_{22} & e_{22} & 0 & 0 & 0 & -e_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
	$\begin{matrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & 0 & 0 & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & 0 & 0 & -2d_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
$\bar{6}m2$ $(m\perp X_1)$ 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{22} \\ -e_{22} & e_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
$\bar{6}2m$ $(2 \parallel X_1)$ 1 comp.	$\begin{matrix} e_{11} & -e_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
	$\begin{matrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2d_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
$\bar{4}3m$, 23 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e_{14} \end{matrix}$

În clasele $\bar{1}$, $2/m$, mmm, $\bar{3}$, $\bar{3}m$, $4/m$, $4/mmm$, $6/m$, $6/mmm$, $m3$, 432, $m3m$, ∞/m, ∞/mm, $\infty\infty$, $\infty\infty m$ acești tensori sînt egali cu zero.

$\{V^2\}$ V — tensorul de rangul trei, γ ($\gamma_{jik} = \gamma_{ijk}$), antisimetric în raport cu doi indici

Clasele	γ_{ijk}	Clasele	γ_{ijk}	Clasele	γ_{ijk}
1 9 comp., 6 inv.	γ_{231} γ_{232} γ_{233} γ_{311} γ_{312} γ_{313} γ_{121} γ_{122} γ_{123}	222 3 comp.,	γ_{231} 0 0 0 γ_{312} 0 0 0 γ_{123}	32, 422, 622, ∞2 2 comp.	γ_{231} 0 0 0 γ_{231} 0 0 0 γ_{123}
2 ($2 \parallel X_2$) 5 comp., 4 inv.	γ_{231} 0 γ_{233} 0 γ_{312} 0 β_{121} 0 γ_{122}	*mm*2 2 comp.,	0 γ_{232} 0 γ_{311} 0 0 0 0 0	3*m*, 4*mm*, 6*mm*, ∞*m* 1 comp.	0 γ_{232} 0 $-\gamma_{232}$ 0 0 0 0 0
2 ($2 \parallel X_3$) 5 comp., 4 inv.	γ_{231} γ_{232} 0 γ_{311} γ_{312} 0 0 0 γ_{123}	$\bar{4}$ 2 comp., 1 inv.	γ_{231} γ_{232} 0 γ_{232} γ_{231} 0 0 0 0	23, 432, 1 comp.	γ_{123} 0 0 0 γ_{123} 0 0 0 γ_{123}
m ($m \perp X_2$) 4 comp., 3 inv.	0 γ_{232} 0 γ_{311} 0 γ_{313} 0 γ_{122} 0	$\bar{4}2m$ 1 comp.	γ_{231} 0 0 0 $-\gamma_{231}$ 0 0 0 0		
m ($m \perp X_3$) 4 comp., 3 inv.	0 0 γ_{233} 0 0 γ_{313} γ_{121} γ_{122} 0	3, 4, 6, ∞ 3 comp.	γ_{231} γ_{232} 0 $-\gamma_{232}$ γ_{231} 0 0 0 γ_{123}		

În clasele $\bar{1}$, 2/*m*, *mmm*, $\bar{3}$, $\bar{3}m$, 4/*m*, 4/*mmm*, $\bar{6}$,6/*m*, $\bar{6}m2$, 6/*mmm*, *m*3, $\bar{4}3m$, *m*3*m*, ∞/*m*, ∞/*mm*, ∞∞*m* $\gamma = 0$.

Tabelul E.13

V^3 — tensorul de rangul trei β

Clasele	β_{ijk}								
1 27 comp., 24 inv.	B_{111} β_{211} β_{311}	β_{122} β_{222} β_{322}	β_{133} β_{233} β_{333}	β_{123} β_{223} β_{323}	β_{131} β_{231} β_{331}	β_{112} β_{212} β_{312}	β_{132} β_{232} β_{332}	β_{113} β_{213} β_{313}	β_{121} β_{221} β_{321}
2 ($2 \parallel X_2$) 13 comp., 12 inv.	0 β_{211} 0	0 β_{222} 0	0 β_{233} 0	β_{123} 0 β_{323}	0 β_{231} 0	β_{112} 0 β_{312}	β_{132} 0 β_{332}	0 β_{213} 0	β_{121} 0 β_{321}
2 ($2 \parallel X_3$) 13 comp., 12 inv.	0 0 β_{311}	0 0 β_{322}	0 0 β_{333}	β_{123} β_{223} 0	β_{131} β_{231} 0	0 0 β_{312}	β_{132} β_{232} 0	β_{113} β_{213} 0	0 0 β_{321}

Clasele	β_{ijk}								
m ($m \perp X_2$) 14 comp., 13 inv.	β_{111} 0 β_{311}	β_{122} 0 β_{322}	β_{133} 0 β_{333}	0 β_{223} 0	β_{131} 0 β_{331}	0 β_{212} 0	0 β_{232} 0	β_{113} 0 β_{313}	0 β_{221} 0
m ($m \perp X_3$) 14 comp., 13 inv.	β_{111} β_{211} 0	β_{122} β_{222} 0	β_{133} β_{233} 0	0 0 β_{323}	0 0 β_{331}	β_{112} β_{212} 0	0 0 β_{332}	0 0 β_{313}	β_{121} β_{221} 0
222 6 comp.	0 0 0	0 0 0	0 0 0	β_{123} 0 0	0 β_{231} 0	0 0 β_{312}	β_{132} 0 0	0 β_{213} 0	0 0 β_{321}
$mm2$ 7 comp.	0 0 β_{311}	0 0 β_{322}	0 0 β_{333}	0 β_{223} 0	β_{131} 0 0	0 0 0	0 β_{232} 0	β_{113} 0 0	0 0 0
3 9 comp., 8 inv.	β_{111} $-\beta_{222}$ β_{311}	$-\beta_{111}$ β_{222} β_{311}	0 0 β_{333}	β_{123} β_{223} 0	β_{131} β_{231} 0	$-\beta_{222}$ $-\beta_{111}$ β_{312}	$-\beta_{231}$ β_{131} 0	β_{223} $-\beta_{123}$ 0	$-\beta_{222}$ $-\beta_{111}$ $-\beta_{312}$
32 ($2 \parallel X_1$) 4 comp.	β_{111} 0 0	$-\beta_{111}$ 0 0	0 0 0	β_{123} 0 0	0 β_{231} 0	0 $-\beta_{111}$ β_{312}	$-\beta_{231}$ 0 0	0 $-\beta_{123}$ 0	0 $-\beta_{111}$ $-\beta_{312}$
$3m$ ($m \perp X_1$) 5 comp.	0 $-\beta_{222}$ β_{311}	0 β_{222} β_{311}	0 0 β_{333}	0 β_{223} 0	β_{131} 0 0	$-\beta_{232}$ 0 0	0 β_{131} 0	β_{223} 0 0	$-\beta_{222}$ 0 0
4, 6, ∞ 7 comp.	0 0 β_{311}	0 0 β_{311}	0 0 β_{333}	β_{123} β_{223} 0	β_{131} β_{231} 0	0 0 β_{312}	$-\beta_{231}$ β_{131} 0	β_{223} $-\beta_{123}$ 0	0 0 $-\beta_{312}$
422, 622, ∞2 3 comp.	0 0 0	0 0 0	0 0 0	β_{123} 0 0	0 β_{231} 0	0 0 β_{312}	$-\beta_{231}$ 0 0	0 $-\beta_{123}$ 0	0 0 $-\beta_{312}$

Clasele	β_{ijk}								
$4mm$, $6mm$ ∞m 4 comp.	0 0 β_{311}	0 0 β_{311}	0 0 β_{333}	0 β_{223} 0	β_{131} 0 0	0 0 0	0 β_{131} 0	β_{223} 0 0	0 0 0
$\bar{4}$ 6 comp., 5 inv.	0 0 β_{311}	0 0 $-\beta_{311}$	0 0 0	β_{123} β_{223} 0	β_{131} β_{231} 0	0 0 β_{312}	β_{231} $-\beta_{131}$ 0	$-\beta_{223}$ β_{123} 0	0 0 β_{312}
$\bar{4}2m$ 3 comp.	0 0 0	0 0 0	0 0 0	β_{123} 0 0	0 β_{231} 0	0 0 β_{312}	β_{231} 0 0	0 β_{123} 0	0 0 β_{312}
$\bar{6}$ 2 comp., 1 inv.	β_{111} $-\beta_{222}$ 0	$-\beta_{111}$ β_{222} 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	$-\beta_{222}$ $-\beta_{111}$ 0	0 0 0	0 0 0	$-\beta_{222}$ $-\beta_{111}$ 0
$\bar{6}m2$ ($m \perp X_1$) 1 comp.	0 $-\beta_{222}$ 0	0 β_{222} 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	$-\beta_{222}$ 0 0	0 0 0	0 0 0	$-\beta_{222}$ 0 0
$\bar{6}2m$ ($2 \parallel X_1$) 1 comp.	β_{111} 0 0	$-\beta_{111}$ 0 0	0 0 0	0 0 0	0 0 0	0 $-\beta_{111}$ 0	0 0 0	0 0 0	0 $-\beta_{111}$ 0
23 2 comp.	0 0 0	0 0 0	0 0 0	β_{123} 0 0	0 β_{123} 0	0 0 β_{123}	β_{321} 0 0	0 β_{321} 0	0 0 β_{321}
$\bar{4}3m$ 1 comp.	0 0 0	0 0 0	0 0 0	β_{123} 0 0	0 β_{123} 0	0 0 β_{123}	β_{123} 0 0	0 β_{123} 0	0 0 β_{123}
432, $\infty\infty$ 1 comp.	0 0 0	0 0 0	0 0 0	β_{123} 0 0	0 β_{123} 0	0 0 β_{123}	$-\beta_{123}$ 0 0	0 $-\beta_{123}$ 0	0 0 $-\beta_{123}$

În clasele $\bar{1}$, $2/m$, mmm, $\bar{3}$, $\bar{3}m$, $4/m$, $4/mmm$, $6/m$, $6/mmm$, $m3$, $m3m$, ∞/m, ∞/mm, $\infty\infty m$ $\beta = 0$.

Tabelul E.14

$\varepsilon V[V^2]$ – pseudotensorul de rangul doi, A ($A_{ilk} = A_{ikl}$), simetric în raport cu doi indici

Sînt dați coeficienții $A_{i\mu}$, legați de componentele A_{ikl} prin regulile de recalculare

$$A_{i\mu} = A_{ikl} \quad (kl \longleftrightarrow \mu = 1, \ldots, 6)$$

Clasele	$A_{i\mu}$	Clasele	$A_{i\mu}$
1, $\bar{1}$ 18 comp., 15 inv.	$\begin{matrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} & A_{15} & A_{16} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} & A_{25} & A_{26} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} & A_{35} & A_{36} \end{matrix}$	32, 3m, $\bar{3}m$ (2 ∥ X_1, m ⊥ X_1) 2 comp.	$\begin{matrix} A_{11} & -A_{11} & 0 & A_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -A_{14} & -A_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
2, m, 2/m (2 ∥ X_2, m ⊥ X_2) 8 comp., 7 inv.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & A_{14} & 0 & A_{16} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & 0 & A_{25} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{34} & 0 & A_{16} \end{matrix}$	4, $\bar{4}$, 4/m, 6, $\bar{6}$, 6/m, ∞, ∞/m, 4 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & A_{15} & A_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{15} & -A_{14} & 0 \\ A_{31} & A_{31} & A_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
2, m, 2/m (2 ∥ X_3, m ⊥ X_3) 8 comp., 7 inv.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & A_{14} & A_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{24} & A_{25} & 0 \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & 0 & 0 & A_{36} \end{matrix}$	422, 4mm, $\bar{4}2m$, 4/mmm, 622, 6mm, $\bar{6}m2$, 6/mmm, ∞2, ∞m, ∞/mm 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & A_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -A_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$
222, mm2, mmm 3 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & A_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{25} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{36} \end{matrix}$		
3, $\bar{3}$ 6 comp., 5 inv.	$\begin{matrix} A_{11} & -A_{11} & 0 & A_{14} & A_{15} & -A_{22} \\ -A_{22} & A_{22} & 0 & A_{15} & -A_{14} & -A_{11} \\ A_{31} & A_{31} & A_{33} & 0 & 0 & 0 \end{matrix}$	23, m3 1 comp.	$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & A_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{14} \end{matrix}$

În clasele 432, $\bar{4}3m$, $m3m$, ∞∞, ∞∞m $\mathbf{A} = 0$.

Tabelul E.15

$\varepsilon\{V^2\}V$ – pseudotensorul de rangul trei, ψ ($\psi_{ijk} = -\psi_{jik}$), antisimetric în raport cu doi indici

Clasele	ψ_{ijk}	Clasele	ψ_{ijk}
1, $\bar{1}$ 9 comp., 6 inv.	$\begin{matrix} \psi_{231} & \psi_{232} & \psi_{233} \\ \psi_{311} & \psi_{312} & \psi_{313} \\ \psi_{121} & \psi_{122} & \psi_{123} \end{matrix}$	2, m, 2/m (2 ∥ X_2, m ⊥ X_2) 5 comp., 4 inv.	$\begin{matrix} \psi_{231} & 0 & \psi_{233} \\ 0 & \psi_{312} & 0 \\ \psi_{121} & 0 & \psi_{123} \end{matrix}$

Tabelul E. 15 (continuare)

Clasele	ψ_{ijk}	Clasele	ψ_{ijk}
$2,\ m,\ 2/m$ $(2 \parallel X_3,\ m \perp X_3)$ 5 comp., 4 inv.	$\begin{matrix} \psi_{231} & \psi_{232} & 0 \\ \psi_{311} & \psi_{312} & 0 \\ 0 & 0 & \psi_{123} \end{matrix}$	$32,\ 3m,\ \overline{3}m,\ 422,$ $4mm,\ \overline{4}2m,\ 4/mmm,$ $622,\ 6mm,\ \overline{6}m2,$ $6/mmm,\ \infty 2,\ \infty m,$ ∞/mm 2 comp.	$\begin{matrix} \psi_{231} & 0 & 0 \\ 0 & \psi_{231} & 0 \\ 0 & 0 & \psi_{123} \end{matrix}$
$222,\ mm2,\ mmm$ 3 comp.	$\begin{matrix} \psi_{231} & 0 & 0 \\ 0 & \psi_{312} & 0 \\ 0 & 0 & \psi_{123} \end{matrix}$		
$3,\ \overline{3},\ 4,\ \overline{4},\ 4/m,$ $6,\ \overline{6},\ 6/m$ $\infty,\ \infty/m$ 3 comp.	$\begin{matrix} \psi_{231} & \psi_{232} & 0 \\ -\psi_{232} & \psi_{231} & 0 \\ 0 & 0 & \psi_{123} \end{matrix}$	$23,\ m3,\ 432,\ \overline{4}3m,$ $m3m,\ \infty\infty,\ \infty\infty m$ 1 comp.	$\begin{matrix} \psi_{123} & 0 & 0 \\ 0 & \psi_{123} & 0 \\ 0 & 0 & \psi_{123} \end{matrix}$

Tabelul E.16

$[V^4]$ — tensorul de rangul patru, 1, simetric în raport cu toți indicii

Clasele	l_{ijmn}	Clasele	l_{ijmn}
$1,\ \overline{1}$ 15 comp., 12 inv.	$\begin{matrix} l_{1111} & l_{1222} & l_{1333} & l_{2233} & l_{1123} \\ l_{2111} & l_{2222} & l_{2333} & l_{3311} & l_{2213} \\ l_{3111} & l_{3222} & l_{3333} & l_{1122} & l_{3312} \end{matrix}$	$4,\ \overline{4},\ 4/m$ 5 comp., 4 inv.	$\begin{matrix} l_{1111} & -l_{21111} & 0 & l_{2233} & 0 \\ l_{2111} & l_{1111} & 0 & l_{2233} & 0 \\ 0 & 0 & l_{3333} & l_{1122} & 0 \end{matrix}$
$2,\ m,\ 2/m$ $(2 \parallel X_2,$ $m \perp X_2)$ 9 comp., 8 inv.	$\begin{matrix} l_{1111} & 0 & l_{1333} & l_{2233} & 0 \\ 0 & l_{2222} & 0 & l_{3311} & l_{2213} \\ l_{3111} & 0 & l_{3333} & l_{1122} & 0 \end{matrix}$	$422,\ 4mm,$ $\overline{4}2m\ 4/mmm$ 4 comp.	$\begin{matrix} l_{1111} & 0 & 0 & l_{2233} & 0 \\ 0 & l_{1111} & 0 & l_{2233} & 0 \\ 0 & 0 & l_{2333} & l_{1122} & 0 \end{matrix}$
$2,\ m,\ 2/m$ $(2 \parallel X_3,$ $m \perp X_3)$ 9 comp., 8 inv.	$\begin{matrix} l_{1111} & l_{1222} & 0 & l_{2233} & 0 \\ l_{2111} & l_{2222} & 0 & l_{3311} & 0 \\ 0 & 0 & l_{3333} & l_{1122} & l_{3312} \end{matrix}$	$6,\ \overline{6},\ 6/m,$ $622,\ 6mm,$ $\overline{6}m2,\ 6/mmm$ $\infty,\ \infty/m,$ $\infty 2,\ \infty m,$ ∞/mm 3 comp.	$\begin{matrix} 3l_{1122} & 0 & 0 & l_{2233} & 0 \\ 0 & 3l_{1122} & 0 & l_{2233} & 0 \\ 0 & 0 & l_{3333} & l_{1122} & 0 \end{matrix}$
$222,\ mm2$ mmm 6 comp.	$\begin{matrix} l_{1111} & 0 & 0 & l_{2233} & 0 \\ 0 & l_{2222} & 0 & l_{3311} & 0 \\ 0 & 0 & l_{3333} & l_{1122} & 0 \end{matrix}$	$23,\ m3,\ 432,$ $\overline{4}3m,\ m3m$ 2 comp.	$\begin{matrix} l_{1111} & 0 & 0 & l_{2233} & 0 \\ 0 & l_{1111} & 0 & l_{2233} & 0 \\ 0 & 0 & l_{1111} & l_{2233} & 0 \end{matrix}$
$3,\ \overline{3}$ 5 comp., 4 inv.	$\begin{matrix} 3l_{1122} & 0 & 0 & l_{2233} & l_{1123} \\ 0 & 3l_{1122} & 0 & l_{2233} & -l_{3111} \\ l_{3111} & -l_{1123} & l_{3333} & l_{1122} & 0 \end{matrix}$	$\infty\infty,\ \infty\infty m$ 1 comp.	$\begin{matrix} 3l_{2233} & 0 & 0 & l_{2233} & 0 \\ 0 & 3l_{2233} & 0 & l_{2233} & 0 \\ 0 & 0 & 3l_{2233} & l_{2233} & 0 \end{matrix}$
$32,\ 3m,\ \overline{3}m$ 4 comp.	$\begin{matrix} 3l_{1122} & 0 & 0 & l_{2233} & l_{1123} \\ 0 & 3l_{1122} & 0 & l_{2233} & 0 \\ 0 & -l_{1123} & l_{3333} & l_{1122} & 0 \end{matrix}$		

Tabelul E.17

V [V^3] — tensorul de rangul patru, k, simetric în raport cu ultimii trei indici

Clasele	k_{ijmn}									
1, $\bar{1}$ 30 comp., 27 inv.	k_{1111} k_{2111} k_{3111}	k_{1222} k_{2222} k_{3222}	k_{1333} k_{2333} k_{3333}	k_{1122} k_{2122} k_{3122}	k_{1233} k_{2233} k_{3233}	k_{1311} k_{2311} k_{3311}	k_{1133} k_{2133} k_{3133}	k_{1211} k_{2211} k_{3211}	k_{1322} k_{2322} k_{3322}	k_{1123} k_{2123} k_{3123}
2, m, $2/m$ ($2 \parallel X_2$, $m \perp X_2$) 16 comp., 15 inv.	k_{1111} 0 k_{3111}	0 k_{2222} 0	k_{1333} 0 k_{3333}	k_{1122} 0 k_{3122}	0 k_{2233} 0	k_{1311} 0 k_{3311}	k_{1133} 0 k_{3133}	0 k_{2211} 0	k_{1322} 0 k_{3322}	0 k_{2123} 0
2, m, $2/m$ ($2 \parallel X_3$, $m \perp X_3$) 16 comp., 15 inv.	k_{1111} k_{2111} 0	k_{1222} k_{2222} 0	0 0 k_{3333}	k_{1122} k_{2122} 0	k_{1233} k_{2233} 0	0 0 k_{3311}	k_{1133} k_{2133} 0	k_{1211} k_{2211} 0	0 0 k_{3322}	0 0 k_{3123}
222, $mm2$, mmm 9 comp.	k_{1111} 0 0	0 k_{2222} 0	0 0 k_{3333}	k_{1122} 0 0	0 k_{2233} 0	0 0 k_{3311}	k_{1133} 0 0	0 k_{2211} 0	0 0 k_{3322}	0 0 0
3. $\bar{3}$ 10 comp., 9 inv.	$3k_{1122}$ $-3k_{1211}$ k_{3111}	$3k_{1211}$ $3k_{1122}$ $-k_{3211}$	0 0 k_{3333}	k_{1122} $-k_{1211}$ $-k_{3111}$	k_{1233} k_{2233} 0	k_{1311} k_{2311} k_{3311}	k_{2233} $-k_{1233}$ 0	k_{1211} k_{1122} k_{3211}	$-k_{1311}$ $-k_{2311}$ k_{3311}	k_{2311} $-k_{1311}$ k_{3123}
32, $3m$, $\bar{3}m$ 6 comp.	$3k_{1122}$ 0 0	0 $3k_{1122}$ $-k_{3211}$	0 0 k_{3333}	k_{1122} 0 0	0 k_{2233} 0	0 k_{2311} k_{3311}	k_{2233} 0 0	0 k_{1122} k_{3211}	0 $-k_{2311}$ k_{3311}	k_{2311} 0 0
4, $\bar{4}$, $4/m$ 8 comp., 7 inv.	k_{1111} k_{2111} 0	$-k_{2111}$ k_{1111} 0	0 0 k_{3333}	k_{1122} $-k_{1211}$ 0	k_{1233} k_{2233} 0	0 0 k_{3311}	k_{2233} $-k_{1233}$ 0	k_{1211} k_{1122} 0	0 0 k_{3311}	0 0 k_{3123}
422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4mmm$ 5 comp.	k_{1111} 0 0	0 k_{1111} 0	0 0 k_{3333}	k_{1122} 0 0	0 k_{2233} 0	0 0 k_{3311}	k_{2233} 0 0	0 k_{1122} 0	0 0 k_{3311}	0 0 0
6, $\bar{6}$, $6/m$, ∞, ∞/m 6 comp.	$3k_{1122}$ $-3k_{1211}$ 0	$3k_{1211}$ $3k_{1122}$ 0	0 0 k_{3333}	k_{1122} $-k_{1211}$ 0	k_{1233} k_{2233} 0	0 0 k_{3311}	k_{2233} $-k_{1233}$ 0	k_{1211} k_{1122} 0	0 0 k_{3311}	0 0 k_{3123}

Clasele	k_{ijmn}									
622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, $\infty 2$, ∞m, ∞/mm 4 comp.	$3k_{1122}$ 0 0	0 $3k_{1122}$ 0	0 0 k_{3333}	k_{1122} 0 0	0 k_{2233} 0	0 0 k_{3311}	k_{2233} 0 0	0 k_{1122} 0	0 0 k_{3311}	0 0 0
23, $m3$ 3 comp.	k_{1111} 0 0	0 k_{1111} 0	0 0 k_{1111}	k_{2233} 0 0	0 k_{2233} 0	0 0 k_{2233}	k_{3322} 0 0	0 k_{3322} 0	0 0 k_{3322}	0 0 0
432, $\bar{4}3m$, $m3m$ 2 comp.	k_{1111} 0 0	0 k_{1111} 0	0 0 k_{1111}	k_{2233} 0 0	0 k_{2233} 0	0 0 k_{2233}	k_{2233} 0 0	0 k_{2233} 0	0 0 k_{2233}	0 0 0
$\infty\infty$, $\infty\infty m$ 1 comp.	$3k_{2233}$ 0 0	0 $3k_{2233}$ 0	0 0 $3k_{2233}$	k_{2233} 0 0	0 k_{2233} 0	0 0 k_{2233}	k_{2233} 0 0	0 k_{2233} 0	0 0 k_{2233}	0 0 0

Tabelul E.18

$[[V^2]^2]$ — tensorul de rangul patru, c, simetric în raport cu cele două perechi de indici şi cu permutarea lor: $c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{klij}$

Sînt daţi coeficienţii $c_{\lambda\mu}$, legaţi de componentele c_{ijkl} prin regulile de recalculare

$$c_{\lambda\mu} = c_{ijkl} \ (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots, 6; \ kl \leftrightarrow \mu = 1, \ldots, 6)$$

Cînd pentru coeficienţii $s_{\lambda\mu}$, legaţi de componentele s_{ijkl} prin regulile de recalculare

$$s_{\lambda\mu} = \begin{cases} s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3; \ kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3; \ kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \\ 2s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6; \ kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 4s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6; \ kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \end{cases}$$

tabelele au o altă formă; este dată şi forma lor.

Clasele	$c_{\lambda\mu}$ şi $s_{\lambda\mu}$	Clasele	$c_{\lambda\mu}$ şi $s_{\lambda\mu}$
1, $\bar{1}$ 21 comp., 18 inv.	c_{11} c_{12} c_{13} c_{14} c_{15} c_{16} c_{22} c_{23} c_{24} c_{25} c_{26} c_{33} c_{34} c_{35} c_{36} c_{44} c_{45} c_{46} c_{55} c_{56} c_{66}	2, m, $2/m$ ($2 \parallel X_2$, $m \perp X_2$) 13 comp., 12 inv.	c_{11} c_{12} c_{13} 0 c_{15} 0 c_{22} c_{23} 0 c_{25} 0 c_{33} 0 c_{35} 0 c_{44} 0 c_{46} c_{55} 0 c_{66}

Clasele	$c_{\lambda\mu}$ și $s_{\lambda\mu}$
2, m, $2/m$ ($2 \parallel X_3$, $m \perp X_3$) 13 comp., 12 inv.	$\begin{matrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & c_{16} \\ & c_{22} & c_{23} & 0 & 0 & c_{26} \\ & & c_{33} & 0 & 0 & c_{36} \\ & & & c_{44} & c_{45} & 0 \\ & & & & c_{55} & 0 \\ & & & & & c_{66} \end{matrix}$
222, $mm2$, mmm 9 comp.	$\begin{matrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & c_{22} & c_{23} & 0 & 0 & 0 \\ & & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & c_{44} & 0 & 0 \\ & & & & c_{55} & 0 \\ & & & & & c_{66} \end{matrix}$
3, $\bar{3}$ 7 comp., 6 inv.*	$\begin{matrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & -c_{25} & 0 \\ & c_{11} & c_{13} & -c_{14} & c_{25} & 0 \\ & & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & c_{44} & 0 & c_{25} \\ & & & & c_{44} & c_{14} \\ & & & & & c_{66} \end{matrix}$
	$\begin{matrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & -s_{25} & 0 \\ & s_{11} & s_{13} & -s_{14} & s_{25} & 0 \\ & & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & s_{44} & 0 & 2s_{25} \\ & & & & s_{14}, & 2s_{14} \\ & & & & & s_{66} \end{matrix}$

Clasele	$c_{\lambda\mu}$ și $s_{\lambda\mu}$
32, $3m$, $\bar{3}m$ 6 comp. *	$\begin{matrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & 0 & 0 \\ & c_{11} & c_{13} & -c_{14} & 0 & 0 \\ & & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & c_{44} & 0 & 0 \\ & & & & c_{44} & c_{14} \\ & & & & & c_{66} \end{matrix}$
	$\begin{matrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & 0 & 0 \\ & s_{11} & s_{13} & -s_{14} & 0 & 0 \\ & & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & s_{44} & 0 & 0 \\ & & & & s_{44} & 2s_{14} \\ & & & & & s_{66} \end{matrix}$
4, $\bar{4}$, $4/m$ 7 comp. 6 inv.	$\begin{matrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & c_{16} \\ & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & -c_{16} \\ & & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & c_{44} & 0 & 0 \\ & & & & c_{44} & 0 \\ & & & & & c_{66} \end{matrix}$
422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$ 6 comp.	
6, $\bar{6}$, $6/m$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, ∞, ∞/m, $\infty 2$, ∞m, ∞/mm 5 comp. *	$\begin{matrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & c_{44} & 0 & 0 \\ & & & & c_{44} & 0 \\ & & & & & c_{66} \end{matrix}$
23, $m3$, 432, $\bar{4}3m$, $m3m$ 3 comp.	$\begin{matrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & c_{44} & 0 & 0 \\ & & & & c_{44} & 0 \\ & & & & & c_{44} \end{matrix}$
$\infty\infty$, $\infty\infty m$ 2 comp.**	

* În clasele 3, $\bar{3}$, 32, $3m$, $\bar{3}m$, 6, $\bar{6}$, $6/m$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, ∞, ∞/m, $\infty 2$, ∞m, ∞/mm, $c_{66} = 1/2\ (c_{11} - c_{12})$, $s_{66} = 2(s_{11} - s_{12})$.

** În clasele $\infty\infty$ și $\infty\infty m$ $c_{44} = 1/2\ (c_{11} - c_{12})$, $s_{44} = 2(s_{11} - s_{12})$.

$[V^2]^2$ — **tensorul de rangul patru, p, simetric în raport cu două perechi de indici:**

$$p_{ijkl} = p_{jikl} = p_{ijlk}$$

Sînt dați coeficienții $p_{\lambda\mu}$, legați de componentele p_{ijkl} prin regulile de recalculare

$$p_{\lambda\mu} = p_{ijkl} \quad (ij \leftrightarrow \lambda = 1,\ldots, 6\,;\ kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3).$$

Cînd pentru coeficienții $\pi_{\lambda\mu}$, legați de componentele tensorului π_{ijkl} prin regulile de recalculare

$$\pi_{\lambda\mu} = \begin{cases} \pi_{ijkl}\ (ij \leftrightarrow \lambda = 1,\ldots, 6\,;\ kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2\pi_{ijkl}\ (ij \leftrightarrow \lambda = 1,\ldots, 6\,;\ kl \leftrightarrow \mu = 4,5, 6), \end{cases}$$

tabelele au altă formă, sînt date și aceste tabele.

Clasele	$p_{\lambda\mu}$ și $\pi_{\lambda\mu}$	Clasele	$p_{\lambda\mu}$ și $\pi_{\lambda\mu}$
1, $\bar{1}$ 36 comp., 33 inv.	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & p_{14} & p_{15} & p_{16} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & p_{24} & p_{25} & p_{26} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & p_{34} & p_{35} & p_{36} \\ p_{41} & p_{42} & p_{43} & p_{44} & p_{45} & p_{46} \\ p_{51} & p_{52} & p_{53} & p_{54} & p_{55} & p_{56} \\ p_{61} & p_{62} & p_{63} & p_{64} & p_{65} & p_{66} \end{matrix}$	3, $\bar{3}$ 12 comp., 11 inv. *	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & p_{14} & -p_{25} & p_{16} \\ p_{12} & p_{11} & p_{13} & -p_{14} & p_{25} & -p_{16} \\ p_{31} & p_{31} & p_{33} & 0 & 0 & 0 \\ p_{41} & -p_{41} & 0 & p_{44} & p_{45} & p_{52} \\ -p_{52} & p_{52} & 0 & -p_{45} & p_{44} & p_{41} \\ -p_{16} & p_{16} & 0 & p_{25} & p_{14} & p_{66} \end{matrix}$
2, m, $2/m$ ($2 \parallel X_2$, $m \perp X_2$) 20 comp., 19 inv.	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & 0 & p_{15} & 0 \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & 0 & p_{25} & 0 \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & 0 & p_{35} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 & p_{46} \\ p_{51} & p_{52} & p_{53} & 0 & p_{55} & 0 \\ p_{61} & p_{62} & p_{63} & p_{64} & 0 & p_{66} \end{matrix}$		$\begin{matrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{13} & \pi_{14} & -\pi_{25} & 2\pi_{62} \\ \pi_{12} & \pi_{13} & \pi_{13} & -\pi_{14} & \pi_{25} & -2\pi_{62} \\ \pi_{31} & \pi_{31} & \pi_{33} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{41} & -\pi_{41} & 0 & \pi_{44} & \pi_{45} & 2\pi_{52} \\ -\pi_{52} & \pi_{52} & 0 & -\pi_{45} & \pi_{44} & 2\pi_{41} \\ -\pi_{62} & \pi_{62} & 0 & \pi_{25} & \pi_{14} & \pi_{66} \end{matrix}$
2, m, $2/m$ ($2 \parallel X_3$, $m \perp X_3$) 20 comp., 19 inv.	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & 0 & 0 & p_{16} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & 0 & 0 & p_{26} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & 0 & 0 & p_{36} \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & p_{45} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{54} & p_{55} & 0 \\ p_{61} & p_{62} & p_{63} & 0 & 0 & p_{66} \end{matrix}$	32, $3m$ $\bar{3}m$ 8 comp.*	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & p_{14} & 0 & 0 \\ p_{12} & p_{11} & p_{13} & -p_{14} & 0 & 0 \\ p_{31} & p_{31} & p_{33} & 0 & 0 & 0 \\ p_{41} & -p_{41} & 0 & p_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_{44} & p_{41} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_{14} & p_{66} \end{matrix}$
222, $mm2$, mmm 12 comp.	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & 0 & 0 & 0 \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & 0 & 0 & 0 \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_{66} \end{matrix}$		$\begin{matrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{13} & \pi_{14} & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{11} & \pi_{13} & -\pi_{14} & 0 & 0 \\ \pi_{31} & \pi_{31} & \pi_{33} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{41} & -\pi_{41} & 0 & \pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 2\pi_{41} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{14} & \pi_{66} \end{matrix}$

* În clasele 3, $\bar{3}$, 32, $3m$, $\bar{3}m$, 6, $\bar{6}$, $6m$, 622, $6mm$, $6/mmm$, ∞, ∞/m, $\infty 2$, ∞m, ∞/mm $p_{65} = \frac{1}{2}(p_{11} - p_{12})$, $\pi_{60} = \pi_{11} - \pi_{12}$

Clasele	$p_{\lambda\mu}$ și $\pi_{\lambda\mu}$	Clasele	$p_{\lambda\mu}$ și $\pi_{\lambda\mu}$
$6, \bar{6}, 6/m$ $\infty, \infty/m$ 8 comp. *	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & 0 & 0 & p_{16} \\ p_{12} & p_{11} & p_{13} & 0 & 0 & -p_{16} \\ p_{31} & p_{31} & p_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & p_{45} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -p_{45} & p_{44} & 0 \\ -p_{16} & p_{16} & 0 & 0 & 0 & p_{66} \end{matrix}$	$422, 4mm, \bar{4}2m, 4/mmm$ 7 comp.	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & 0 & 0 & 0 \\ p_{12} & p_{11} & p_{13} & 0 & 0 & 0 \\ p_{31} & p_{31} & p_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_{66} \end{matrix}$
		$622, 6mm, \bar{6}m2, 6/mmm, \infty 2, \infty m, \infty/mm$ 6 comp.*	
	$\begin{matrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{13} & 0 & 0 & 2\pi_{62} \\ \pi_{12} & \pi_{11} & \pi_{13} & 0 & 0 & -2\pi_{62} \\ \pi_{31} & \pi_{31} & \pi_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & \pi_{45} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\pi_{45} & \pi_{44} & 0 \\ -\pi_{62} & \pi_{62} & 0 & 0 & 0 & \pi_{66} \end{matrix}$	$23, m3$ 4 comp.	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{21} & 0 & 0 & 0 \\ p_{21} & p_{11} & p_{12} & 0 & 0 & 0 \\ p_{12} & p_{21} & p_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_{44} \end{matrix}$
$4, \bar{4}, 4/m$ 10 comp. 9 inv.	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & 0 & 0 & p_{16} \\ p_{12} & p_{11} & p_{13} & 0 & 0 & -p_{16} \\ p_{31} & p_{31} & p_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & p_{45} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -p_{45} & p_{44} & 0 \\ p_{61} & -p_{61} & 0 & 0 & 0 & p_{66} \end{matrix}$	$432, \bar{4}3m, m3m$ 3 comp.	$\begin{matrix} p_{11} & p_{12} & p_{12} & 0 & 0 & 0 \\ p_{12} & p_{11} & p_{12} & 0 & 0 & 0 \\ p_{12} & p_{12} & p_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_{44} \end{matrix}$
		$\infty\infty, \infty\infty m$ 2 comp. **	

* În clasele $3, \bar{3}, 32, 3m, \bar{3}m, 6, \bar{6}, 6/m$, 622, $6mm$, $6/mmm$, ∞, ∞/m, $\infty 2$, ∞m, ∞/mm $p_{66} = \frac{1}{2}(p_{11} - p_{22})$, $\pi_{66} = \pi_{11} - \pi_{22}$

** În clasele $\infty\infty$ și $\infty\infty m$ $p_{44} = \frac{1}{2}(p_{11} - p_{12})$, $\pi_{44} = \pi_{11} - \pi_{12}$.

Tabelul E.20

$[(V^2)^2]$ — tensorul de rangul patru, n, simetric față de permutarea indicilor : $n_{klij} = n_{ijkl}$

Clasele	n_{ijkl}								
$1, \bar{1}$ 45 comp., 42 inv.	n_{1111}	n_{1122}	n_{1133}	n_{1123}	n_{1131}	n_{1112}	n_{1132}	n_{1113}	n_{1121}
		n_{2222}	n_{2233}	n_{2223}	n_{2231}	n_{2212}	n_{2232}	n_{2213}	n_{2221}
			n_{3333}	n_{3323}	n_{3331}	n_{3312}	n_{3332}	n_{3313}	n_{3321}
				n_{2323}	n_{2331}	n_{2312}	n_{2332}	n_{2313}	n_{2321}
					m_{3131}	n_{3112}	n_{3132}	n_{3113}	n_{3121}
						n_{1212}	n_{1232}	n_{1213}	n_{1221}
							n_{3232}	n_{3213}	n_{3221}
								n_{1313}	n_{1321}
									n_{2121}

Clasele	n_{ijkl}								
2, m, $2/m$ ($2 \parallel X_2$, $m \perp X_2$) 25 comp., 24 inv.	n_{1111}	n_{1122} n_{2222}	n_{1133} n_{2233} n_{3333}	0 0 0 n_{2323}	n_{1131} n_{2231} n_{3331} 0 n_{3131}	0 0 0 n_{2312} 0 n_{1212}	0 0 0 n_{2332} 0 n_{1232} n_{3232}	n_{1113} n_{2213} n_{3313} 0 n_{3113} 0 0 n_{1313}	0 0 0 n_{2321} 0 n_{1221} n_{3221} 0 n_{2121}
2, m, $2/m$ ($2 \parallel X_3$, $m \perp X_3$) 25 comp., 24 inv.	n_{1111}	n_{1122} n_{2222}	n_{1133} n_{2233} n_{3333}	0 0 0 n_{2323}	0 0 0 n_{2331} n_{3131}	n_{1112} n_{2212} n_{3312} 0 0 n_{1212}	0 0 0 n_{2332} n_{3132} 0 n_{3232}	0 0 0 n_{2313} n_{3113} 0 n_{3213} n_{1313}	n_{1121} n_{2221} n_{3321} 0 0 n_{1221} 0 0 n_{2121}
222, $mm2$, mmm 15 comp.	n_{1111}	n_{1122} n_{2222}	n_{1133} n_{2233} n_{3333}	0 0 0 n_{2323}	0 0 0 0 n_{3131}	0 0 0 0 0 n_{1212}	0 0 0 n_{2332} 0 0 n_{3232}	0 0 0 0 n_{3113} 0 0 n_{1313}	0 0 0 0 0 n_{1221} 0 0 n_{2121}
4, $\bar{4}$, $4/m$ 13 comp., 12 inv.	n_{1111}	n_{1122} n_{1111}	n_{1133} n_{1133} n_{3333}	0 0 0 n_{2323}	0 0 0 n_{2331} n_{3131}	n_{1112} n_{2212} n_{3312} 0 0 n_{1212}	0 0 0 n_{2332} 0 0 n_{3131}	0 0 0 0 n_{2332} 0 $-n_{2331}$ n_{2323}	$-n_{2212}$ $-n_{1112}$ $-n_{3312}$ 0 0 n_{1221} 0 0 n_{1212}
422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$ 9 comp.	n_{1111}	n_{1122} n_{1111}	n_{1133} n_{1133} n_{3333}	0 0 0 n_{2323}	0 0 0 0 n_{3131}	0 0 0 0 0 n_{1212}	0 0 0 n_{2332} 0 0 n_{3131}	0 0 0 0 n_{3113} 0 0 n_{2323}	0 0 0 0 0 n_{1221} 0 0 n_{1212}

Clasele	n_{ijkl}								
3, $\bar{3}$ 15 comp., 14 inv.	n_{1111}	n_{1122} n_{1111}	n_{1133} n_{1133} n_{3333}	n_{1123} $-n_{1123}$ 0 n_{2323}	n_{1131} $-n_{1131}$ 0 n_{2331} n_{3131}	n_{1112} n_{1112} n_{3312} $-n_{1113}$ n_{1132} n_{1212}	n_{1132} $-n_{1132}$ 0 n_{2332} 0 $-n_{1131}$ n_{3131}	n_{1113} $-n_{1113}$ 0 0 n_{2332} n_{1123} $-n_{2331}$ n_{2323}	$-n_{1112}$ $-n_{1112}$ $-n_{3312}$ $-n_{1113}$ n_{1132} n_{1221} $-n_{1131}$ n_{1123} n_{1212}
32, $3m$, $\bar{3}m$ 10 comp. *	n_{1111}	n_{1122} n_{1111}	n_{1133} n_{1133} n_{3333}	n_{1123} $-n_{1123}$ 0 n_{2323}	0 0 0 0 n_{3131}	0 0 0 0 n_{1132} n_{1212}	n_{1132} $-n_{1132}$ 0 n_{2332} 0 0 n_{3131}	0 0 0 0 n_{2332} n_{1123} 0 n_{2323}	0 0 0 0 n_{1132} n_{1221} 0 n_{1123} n_{1212}
6, $\bar{6}$ $6/m$, ∞, ∞$/m$ 11 comp. *	n_{1111}	n_{1122} n_{1111}	n_{1133} n_{1133} n_{3333}	0 0 0 n_{2323}	0 0 0 n_{2331} n_{3131}	n_{1112} n_{1112} n_{3312} 0 0 n_{1212}	0 0 0 n_{2332} 0 0 n_{3131}	0 0 0 0 n_{2332} 0 $-n_{2331}$ n_{2323}	$-n_{1112}$ $-n_{1112}$ $-n_{3312}$ 0 0 n_{1221} 0 0 n_{1212}
622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, ∞2, ∞m, ∞$/mm$ 8 comp. *	n_{1111}	n_{1122} n_{1111}	n_{1133} n_{1133} n_{3333}	0 0 0 n_{2323} n_{3131}	0 0 0 0	0 0 0 0 0	0 0 0 n_{2332} 0 0 n_{3131}	0 0 0 0 n_{2332} 0 n_{2323}	0 0 0 0 0 n_{1221} 0 0 n_{1212}
23, $m3$ 5 comp.	n_{1111}	n_{1122} n_{1111}	n_{1122} n_{1122} n_{1111}	0 0 0 n_{2323}	0 0 0 0 n_{2323}	0 0 0 0 0 n_{2323}	0 0 0 n_{2332} 0 n_{2332} n_{3232}	0 0 0 0 n_{2332} 0 0 n_{3232}	0 0 0 0 0 n_{2332} 0 0 n_{3232}

Tabelul E.20 (continuare)

Clasele	n_{ijkl}								
$432, \bar{4}3m, m3m$ 4 comp. $\infty\infty, \infty\infty m$ 3 comp. **	n_{1111}	n_{1122}	n_{1122}	0	0	0	0	0	0
		n_{1111}	n_{1122}	0	0	0	0	0	0
			n_{1111}	0	0	0	0	0	0
				n_{2323}	0	0	n_{2332}	0	0
					n_{2323}	0	0	n_{2332}	0
						n_{2323}	0	0	n_{2332}
							n_{2323}	0	0
								n_{2323}	0
									n_{2323}

* În clasele $3, \bar{3}, 32, 3m, \bar{3}m, 6, \bar{6}, 6/m, 622, 6mm, \bar{6}m2, 6/mmm, \infty, \infty/m, \infty 2, \infty m, \infty/mm$, $n_{1111} = n_{1122} + n_{1212} + n_{1221}$.

** În clasele $\infty\infty$ și $\infty\infty m$, $n_{1111} = n_{1\,122} + n_{2323} + n_{2332}$.

Tabelul E.21

$[V]^2 V^2$ — tensorul de rangul patru, h, simetric în raport cu doi indici: $h_{ijkl} = h_{ijkl}$

Clasele	h_{ijkl}								
$1, \bar{1}$ 54 comp., 51 inv.	h_{1111}	h_{1122}	h_{1133}	h_{1123}	h_{1131}	h_{1112}	h_{1132}	h_{1113}	h_{1121}
	h_{2211}	h_{2222}	h_{2233}	h_{2223}	h_{2231}	h_{2212}	h_{2232}	h_{2213}	h_{2221}
	h_{3311}	h_{3322}	h_{3333}	h_{3323}	h_{3331}	h_{3312}	h_{3332}	h_{3313}	h_{3321}
	h_{2311}	h_{2322}	h_{2333}	h_{2323}	h_{2331}	h_{2312}	h_{2332}	h_{2313}	h_{2321}
	h_{3111}	h_{3122}	h_{3133}	h_{3123}	h_{3131}	h_{3112}	h_{3132}	h_{3113}	h_{3121}
	h_{1211}	h_{1222}	h_{1233}	h_{1223}	h_{1231}	h_{1212}	h_{1232}	h_{1213}	h_{1221}
$2, m, 2/m$ $(2 \parallel X_2, m \perp X_2)$ 28 comp., 27 inv.	h_{1111}	h_{1122}	h_{1133}	0	h_{1131}	0	0	h_{1113}	0
	h_{2211}	h_{2222}	h_{2233}	0	h_{2231}	0	0	h_{2213}	0
	h_{3311}	h_{3322}	h_{3333}	0	h_{3331}	0	0	h_{3313}	0
	0	0	0	h_{2323}	0	h_{2312}	h_{2332}	0	h_{2321}
	h_{3111}	h_{3122}	h_{3133}	0	h_{3131}	0	0	h_{3113}	0
	0	0	0	h_{1223}	0	h_{1212}	h_{1232}	0	h_{1221}
$2, m, 2/m$ $(2 \parallel X_3, m \perp X_3)$ 28 comp., 27 inv.	h_{1111}	h_{1122}	h_{1133}	0	0	h_{1112}	0	0	h_{1121}
	h_{2211}	h_{2222}	h_{2233}	0	0	h_{2212}	0	0	h_{2221}
	h_{3311}	h_{3322}	h_{3333}	0	0	h_{3312}	0	0	h_{3321}
	0	0	0	h_{2323}	h_{2331}	0	h_{2332}	h_{2313}	0
	0	0	0	h_{3123}	h_{3131}	0	h_{3132}	h_{3113}	0
	h_{1211}	h_{1222}	h_{1233}	0	0	h_{1212}	0	0	h_{1221}

Clasele	h_{ijkl}								
222, *mm*2, *mmm* 15 comp.	h_{1111}	h_{1122}	h_{1133}	0	0	0	0	0	0
	h_{2211}	h_{2222}	h_{2233}	0	0	0	0	0	0
	h_{3311}	h_{3322}	h_{3333}	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{2332}	0	0
	0	0	0	0	h_{3131}	0	0	h_{3113}	0
	0	0	0	0	0	h_{1212}	0	0	h_{1221}
4, $\bar{4}$, 4/*m* 14 comp., 13 inv.	h_{1111}	h_{1122}	h_{1133}	0	0	h_{1112}	0	0	$-h_{2212}$
	h_{1122}	h_{1111}	h_{1133}	0	0	h_{2212}	0	0	$-h_{1112}$
	h_{3311}	h_{3311}	h_{3333}	0	0	h_{3312}	0	0	$-h_{3312}$
	0	0	0	h_{2323}	h_{2331}	0	h_{3131}	$-h_{3123}$	0
	0	0	0	h_{3123}	h_{3131}	0	$-h_{2331}$	h_{2323}	0
	h_{1211}	$-h_{1211}$	0	0	0	h_{1212}	0	0	h_{1212}
422, 4*mm*, $\bar{4}$2*m*, 4/*mmm* 8 comp.,	h_{1111}	h_{1122}	h_{1133}	0	0	0	0	0	0
	h_{1122}	h_{1111}	h_{1133}	0	0	0	0	0	0
	h_{3311}	h_{3311}	h_{3333}	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{3131}	0	0
	0	0	0	0	h_{3131}	0	0	h_{2323}	0
	0	0	0	0	0	h_{1212}	0	0	h_{1212}
3, $\bar{3}$ 18 comp., 17 inv. *	h_{1111}	h_{1122}	h_{1133}	h_{1123}	h_{1131}	h_{1112}	h_{1132}	h_{1113}	$-h_{2212}$
	h_{1122}	h_{1111}	h_{1133}	$-h_{1123}$	$-h_{1131}$	h_{2212}	$-h_{1132}$	$-h_{1113}$	$-h_{1112}$
	h_{3311}	h_{3311}	h_{3333}	0	0	h_{3312}	0	0	$-h_{3312}$
	h_{2311}	$-h_{2311}$	0	h_{2323}	h_{2331}	$-h_{3111}$	h_{3131}	$-h_{3123}$	$-h_{3111}$
	h_{3111}	$-h_{3111}$	0	h_{3123}	h_{3131}	h_{2311}	$-h_{2331}$	h_{2323}	h_{2311}
	h_{1211}	$-h_{1211}$	0	$-h_{1113}$	h_{1132}	h_{1212}	$-h_{1131}$	h_{1123}	h_{1212}
32, 3*m*, $\bar{3}$*m* 10 comp. **	h_{1111}	h_{1122}	h_{1133}	h_{1123}	0	0	h_{1132}	0	0
	h_{1122}	h_{1111}	h_{1133}	$-h_{1123}$	0	0	$-h_{1132}$	0	0
	h_{3311}	h_{3311}	h_{3333}	0	0	0	0	0	0
	h_{2311}	$-h_{2311}$	0	h_{2323}	0	0	h_{3131}	0	0
	0	0	0	0	h_{3131}	h_{2311}	0	h_{2323}	h_{2311}
	0	0	0	0	h_{1132}	h_{1212}	0	h_{1123}	h_{1212}
6, $\bar{6}$, 6/*m*, ∞ ∞/*m* 12 comp. *	h_{1111}	h_{1122}	h_{1133}	0	0	h_{1112}	0	0	$-h_{2212}$
	h_{1122}	h_{1111}	h_{1133}	0	0	h_{2212}	0	0	$-h_{1112}$
	h_{3311}	h_{3311}	h_{3333}	0	0	h_{3312}	0	0	$-h_{3312}$
	0	0	0	h_{2323}	h_{2331}	0	h_{3131}	$-h_{3123}$	0
	0	0	0	h_{3123}	h_{3131}	0	$-h_{2331}$	h_{2323}	0
	h_{1211}	$-h_{1211}$	0	0	0	h_{1212}	0	0	h_{1212}
622, 6*mm*, $\bar{6}$*m*2, 6/*mmm*, ∞2, ∞*m* ∞/*mm* 7 comp. **	h_{1111}	h_{1122}	h_{1133}	0	0	0	0	0	0
	h_{1122}	h_{1111}	h_{1133}	0	0	0	0	0	0
	h_{3311}	h_{3311}	h_{3333}	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{3131}	0	0
	0	0	0	0	h_{3131}	0	0	h_{2323}	0
	0	0	0	0	0	h_{1212}	0	0	h_{1212}

Clasele	h_{ijkl}								
23, $m3$ 5 comp.	h_{1111}	h_{1122}	h_{2211}	0	0	0	0	0	0
	h_{2211}	h_{1111}	h_{1122}	0	0	0	0	0	0
	h_{1122}	h_{2211}	h_{1111}	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{2323}	0	0
	0	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{2332}	0
	0	0	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{2332}
432, $\bar{4}3m$, $m3m$ 3 comp. $\infty\infty$, $\infty\infty m$ 2 comp. ***	h_{1111}	h_{1122}	h_{1122}	0	0	0	0	0	0
	h_{1122}	h_{1111}	h_{1122}	0	0	0	0	0	0
	h_{1122}	h_{1122}	h_{1111}	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{2323}	0	0
	0	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{2323}	0
	0	0	0	0	0	h_{2323}	0	0	h_{2323}

* În clasele 3, $\bar{3}$, 6, $\bar{6}$, $6/m$, ∞, ∞/m, $h_{1111} = h_{1122} + 2h_{1212}$, iar $h_{2212} - h_{1112} = 2h_{1211}$.

** În clasele 32, $3m$, $\bar{3}m$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, $\infty 2$, ∞m, ∞/mm, $h_{1111} = h_{1122} + h_{1212}$.

*** În clasele $\infty\infty$ și $\infty\infty m$, $h_{1111} = h_{1122} + 2h_{2323}$.

Tabelul E.22

V^4 — tensorul de rangul patru, b

Clasele	b_{ijkl}								
1, $\bar{1}$ 81 comp., 78 inv.	b_{1111}	b_{1122}	b_{1133}	b_{1123}	b_{1131}	b_{1112}	b_{1122}	b_{1113}	b_{1121}
	b_{2211}	b_{2222}	b_{2233}	b_{2223}	b_{2231}	b_{2212}	b_{2232}	b_{2213}	b_{2231}
	b_{3311}	b_{3322}	b_{3333}	b_{3323}	b_{3331}	b_{3312}	b_{3332}	b_{3313}	b_{3331}
	b_{2311}	b_{2322}	b_{2333}	b_{2323}	b_{2331}	b_{2312}	b_{2332}	b_{2313}	b_{2321}
	b_{3111}	b_{3122}	b_{3133}	b_{3123}	b_{3131}	b_{3112}	b_{3132}	b_{3113}	b_{3121}
	b_{1211}	b_{1222}	b_{1233}	b_{1223}	b_{1231}	b_{1212}	b_{1232}	b_{1213}	b_{1221}
	b_{3211}	b_{3222}	b_{3233}	b_{3223}	b_{3231}	b_{3212}	b_{3232}	b_{3213}	b_{3221}
	b_{1311}	b_{1322}	b_{1333}	b_{1323}	b_{1331}	b_{1312}	b_{1332}	b_{1313}	b_{1321}
	b_{2111}	b_{2122}	b_{2133}	b_{2123}	b_{2131}	b_{2112}	b_{2132}	b_{2113}	b_{2121}
2, m, $2/m$ ($2 \parallel X_2$, $m \perp X_2$) 41 comp., 40 inv.	b_{1111}	b_{1122}	b_{1133}	0	b_{1131}	0	0	b_{1113}	0
	b_{2211}	b_{2222}	b_{2233}	0	b_{2231}	0	0	b_{2213}	0
	b_{3311}	b_{3322}	b_{3333}	0	b_{3331}	0	0	b_{3313}	0
	0	0	0	b_{2323}	0	b_{2312}	b_{2332}	0	b_{2321}
	b_{3111}	b_{3122}	b_{3133}	0	b_{3131}	0	0	b_{3113}	0
	0	0	0	b_{1223}	0	b_{1212}	b_{1232}	0	b_{1221}
	0	0	0	b_{3223}	0	b_{3212}	b_{3232}	b_{3232}	b_{3121}
	b_{1311}	b_{1322}	b_{1333}	0	b_{1331}	0	0	b_{1313}	0
	0	0	0	b_{2123}	0	b_{2112}	b_{2132}	0	b_{2121}

Clasele	b_{ijkl}								
	b_{1111}	b_{1122}	b_{1133}	0	0	b_{1112}	0	0	b_{1121}
	b_{2211}	b_{2222}	b_{2233}	0	0	b_{2212}	0	0	b_{2221}
	b_{3311}	b_{3322}	b_{3333}	0	0	b_{3312}	0	0	b_{3321}
2, m, $2/m$	0	0	0	b_{2323}	b_{2331}	0	b_{2332}	b_{2313}	0
($2 \parallel X_3$, $m \perp X_3$)	0	0	0	b_{3123}	b_{3131}	0	b_{3132}	b_{3113}	0
41 comp., 40 inv.	b_{1211}	b_{1222}	b_{1233}	0	0	b_{1212}	0	0	b_{1221}
	0	0	0	b_{3223}	b_{3231}	0	b_{3232}	b_{3213}	0
	0	0	0	b_{1323}	b_{1331}	0	b_{1332}	b_{1313}	0
	b_{2111}	b_{2122}	b_{2133}	0	0	b_{2112}	0	0	b_{2121}
	b_{1111}	b_{1122}	b_{1133}	0	0	3	0	0	0
	b_{2211}	b_{2222}	b_{2233}	0	0	0	0	0	0
	b_{3311}	b_{3332}	b_{3333}	0	0	0	0	0	0
222, $mm2$, mmm	0	0	0	b_{2323}	0	0	b_{2332}	0	0
21 comp.	0	0	0	0	b_{3131}	0	0	b_{3113}	0
	0	0	0	0	0	b_{1212}	0	0	b_{1221}
	0	0	0	b_{3223}	0	0	b_{3232}	3	0
	0	0	0	0	b_{1331}	0	0	b_{1313}	0
	0	0	0	0	0	b_{2112}	0	0	b_{2121}
	b_{1111}	b_{1122}	b_{1133}	0	0	b_{1112}	0	0	$-b_{2212}$
	b_{1122}	b_{1111}	b_{1133}	0	0	b_{2212}	0	0	$-b_{1112}$
	b_{3311}	b_{3311}	b_{3333}	0	0	b_{3312}	0	0	$-b_{3312}$
4, $\bar{4}$, $4/m$	0	0	0	b_{2323}	b_{2331}	0	b_{2332}	b_{2313}	0
21 comp., 20 inv.	0	0	0	b_{3123}	b_{3131}	0	b_{3132}	b_{3113}	0
	b_{1211}	b_{1222}	b_{1233}	0	0	b_{1212}	0	0	b_{1221}
	0	0	0	b_{3113}	$-b_{3132}$	0	b_{3131}	$-b_{3123}$	0
	0	0	0	$-b_{2313}$	b_{2332}	0	$-b_{2331}$	b_{2323}	0
	$-b_{1222}$	$-b_{1211}$	$-b_{1233}$	0	0	b_{1221}	0	0	b_{1212}
	b_{1111}	b_{1122}	b_{1133}	0	0	0	0	0	0
	b_{1122}	b_{1111}	b_{1133}	0	0	0	0	0	0
	b_{3311}	b_{3311}	b_{3333}	0	0	0	0	0	0
422, $4mm$, $\bar{4}2m$,	0	0	0	b_{2323}	0	0	b_{2332}	0	0
$4/mmm$	0	0	0	0	b_{3131}	0	0	b_{3113}	0
11 comp.	0	0	0	0	0	b_{1212}	0	0	b_{1221}
	0	0	0	b_{3113}	0	0	b_{3131}	0	0
	0	0	0	0	b_{2332}	0	0	b_{2323}	0
	0	0	0	0	0	b_{1221}	0	0	b_{1212}
	b_{1111}	b_{1122}	b_{1133}	b_{1123}	b_{1131}	b_{1112}	b_{1132}	b_{1113}	$-b_{2212}$
	b_{1122}	b_{1111}	b_{1133}	$-b_{1123}$	$-b_{1131}$	b_{2212}	$-b_{1132}$	$-b_{1113}$	$-b_{1112}$
	b_{3311}	b_{3311}	b_{3333}	0	0	b_{3312}	0	0	$-b_{3312}$
3, $\bar{3}$	b_{2311}	$-b_{2311}$	0	b_{2323}	b_{2331}	$-b_{1311}$	b_{2332}	b_{2313}	$-b_{1311}$
27 comp.,	b_{3111}	$-b_{3111}$	0	b_{3123}	b_{3131}	b_{3211}	b_{3132}	b_{3113}	b_{3211}
26 inv.*	b_{1211}	b_{1222}	b_{1233}	$-b_{1113}$	b_{1132}	b_{1212}	$-b_{1131}$	b_{1123}	b_{1221}
	b_{3211}	$-b_{3211}$	0	b_{3113}	$-b_{3132}$	$-b_{3111}$	b_{3131}	$-b_{3123}$	$-b_{3111}$
	b_{1311}	$-b_{1311}$	0	$-b_{2313}$	b_{2332}	b_{2311}	$-b_{2331}$	b_{2323}	b_{2311}
	$-b_{1222}$	$-b_{1211}$	$-b_{1233}$	$-b_{1113}$	b_{1132}	b_{1221}	$-b_{1131}$	b_{1123}	b_{1212}

Clasele	b_{ijkl}								
32, 3*m*, $\bar{3}m$	b_{1111}	b_{1122}	b_{1133}	b_{1123}	0	0	b_{1132}	0	0
14 comp. **	b_{1122}	b_{1111}	b_{1133}	$-b_{1123}$	0	0	$-b_{1132}$	0	0
	b_{3311}	b_{3311}	b_{3333}	0	0	0	0	0	0
	b_{2311}	$-b_{2311}$	0	b_{2323}	0	0	b_{2332}	0	0
	0	0	0	0	b_{3131}	b_{3211}	0	b_{3113}	b_{3211}
	0	0	0	0	b_{1132}	b_{1212}	0	b_{1123}	b_{1221}
	b_{3211}	$-b_{3211}$	0	b_{3113}	0	0	b_{3131}	0	0
	0	0	0	0	b_{2332}	b_{2311}	0	b_{2323}	b_{2311}
	0	0	0	0	b_{1132}	b_{1221}	0	b_{1123}	b_{1212}
6, $\bar{6}$, 6/*m*, ∞, ∞/*m*	b_{1111}	b_{1122}	b_{1133}	0	0	b_{1112}	0	0	$-b_{2212}$
19 comp. *	b_{1122}	b_{1111}	b_{1133}	0	0	b_{2212}	0	0	$-b_{1112}$
	b_{3311}	b_{3311}	b_{3333}	0	0	b_{3312}	0	0	$-b_{3312}$
	0	0	0	b_{2323}	b_{2331}	0	b_{2332}	b_{2313}	0
	0	0	0	b_{3123}	b_{3131}	0	b_{3132}	b_{3113}	0
	b_{1211}	b_{1222}	b_{1233}	0	0	b_{1212}	0	0	b_{1221}
	0	0	0	b_{3113}	$-b_{3132}$	0	b_{3131}	$-b_{3123}$	0
	0	0	0	$-b_{2313}$	b_{2332}	0	$-b_{2331}$	b_{2323}	0
	$-b_{1222}$	$-b_{1211}$	$-b_{1233}$	0	0	b_{1221}	0	0	b_{1212}
622, 6*mm*, 6*m*2, 6/*mmm*, ∞2, ∞*m*, ∞/*mm*	b_{1111}	b_{1122}	b_{1133}	0	0	0	0	0	0
10 comp. **	b_{1122}	b_{1111}	b_{1133}	0	0	0	0	0	0
	b_{3311}	b_{3311}	b_{3333}	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	b_{2323}	0	0	b_{2332}	0	0
	0	0	0	0	b_{3131}	0	0	b_{3113}	0
	0	0	0	0	0	b_{1212}	0	0	b_{1221}
	0	0	0	b_{3113}	0	0	b_{3131}	0	0
	0	0	0	0	b_{2332}	0	0	b_{2323}	0
	0	0	0	0	0	b_{1221}	0	0	b_{1212}
23, *m*3	b_{1111}	b_{1122}	b_{2211}	0	0	0	0	0	0
7 comp.	b_{2211}	b_{1111}	b_{1122}	0	0	0	0	0	0
	b_{1112}	b_{2211}	b_{1111}	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	b_{2323}	0	0	b_{2332}	0	0
	0	0	3	0	b_{2323}	0	0	b_{2332}	0
	0	0	0	0	0	b_{2323}	0	0	b_{2332}
	0	0	0	b_{3223}	0	0	b_{3232}	0	0
	0	0	0	0	b_{2323}	0	0	b_{3232}	0
	0	0	0	0	0	b_{3223}	0	0	b_{3232}

Clasele	b_{ijkl}								
432, $\bar{4}3m$, $m3m$ 4 comp., $\infty\infty$, $\infty\infty m$ 3 comp. ***	b_{1111}	b_{1122}	b_{1122}	0	0	0	0	0	0
	b_{1122}	b_{1111}	b_{1122}	0	0	0	0	0	0
	b_{1122}	b_{1122}	b_{1111}	0	0	0	0	0	0
	0	0	0	b_{2323}	0	0	b_{2332}	0	0
	0	0	0	0	b_{2323}	0	0	b_{2332}	0
	0	0	0	0	0	b_{2323}	0	0	b_{2332}
	0	0	0	b_{2332}	0	0	b_{2323}	0	0
	0	0	0	0	b_{2332}	0	0	b_{2323}	0
	0	0	0	0	0	b_{2332}	0	0	b_{2323}

* În clasele 3, $\bar{3}$, 6, $\bar{6}$, $6/m$, ∞, $\infty' m$, $b_{1111} = b_{1122} + b_{1212} + b_{1221}$, iar $b_{1112} - b_{2212} = b_{1222} - b_{1211}$.
** În clasele 32, $3m$, $\bar{3}m$, 622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$, $\infty 2$, ∞m și ∞/mm, $b_{1111} = b_{1122} + b_{1212} + b_{1221}$.
*** În clasele $\infty\infty$ și $\infty\infty m$, $b_{1111} = b_{1122} + b_{2323} + b_{2332}$.

Tabelul E.23

$V[[V^2]^2]$ — tensorul de rangul cinci, Q, simetric în raport cu două perechi de indici și în raport cu permutarea acestor perechi : $Q_{mijkl} = Q_{mjikl} = Q_{mijlk} = Q_{mklij}$, pentru cîteva clase cristalografice

Pentru celelalte clase, v. Kopţik (1966). Sînt daţi coeficienţii $Q_{m\lambda\mu}$, legaţi de componentele Q_{mijkl} prin regulile de recalculare

$$Q_{m\lambda\mu} = \begin{cases} Q_{mijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3; \quad kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2Q_{mijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3; \quad kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \\ 2Q_{mijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6; \quad kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 4Q_{mijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6; \quad kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \end{cases}$$

Sînt daţi numai indicii pentru coeficienţii diferiţi de zero : expresiile de genul $216 = 111 + 3 \cdot 122$ înseamnă $Q_{216} = Q_{111} + 3Q_{122}$.

Clasa 222 (12 comp.) : 114, 124, 134, 156, 215, 225, 235, 246, 316, 326, 336, 345.

Clasa 32 (8 comp.) : $166 = 2 \cdot 112 = -2\ (111 + 122)$, $216 = 111 + 3 \cdot 122$, $226 = -3 \cdot 111 - 122$, $236 = 2 \cdot 123 = -2 \cdot 113$, $225 = -114$, $215 = -124$, $246 = -156 = 114 - 124$, $235 = -134$, $245 = 2 \cdot 144 = -2 \cdot 155$, $346 = 2 \cdot 325 = -2 \cdot 315$.

Clasa $42m$ (7 comp.) : $144 = 225$, $124 = 215$, $134 = 235$, $156 = 246$, $316 = 326$, 336, 345.

Clasa $\bar{4}3m$ (3 comp.) : $114 = 225 = 336$, $124 = 235 = 316 = 134 = 215 = 326$, $156 = 246 = 345$.

Clasa 432 (1 comp.) : $124 = 235 = 316 = -134 = -215 = -326$.

Tabelul E.24

$[[V^2]^3]$ — tensorul de rangul șase, C, simetric în raport cu prima, cu a doua și cu a treia pereche de indici precum și în raport cu permutările lor, pentru unele clase cristalografice și unele clase limită:

$$C_{ijklmn} = C_{jiklmn} = C_{ijlkmn} = C_{ijklnm}\ C_{ijmnkl} = C_{klijmn}$$

Pentru celelalte clase v. Mason (1966) sau Fumi (1951) 1952, b).
Sînt dați coeficienții $C_{\lambda\mu\nu}$, legați de componentele tensoriale, C_{ijklmn}, prin regulile de recalculare

$$C_{\lambda\mu\nu} = C_{ijklmn}\ (ij \leftrightarrow \lambda,\ kl \leftrightarrow \mu,\ mn \leftrightarrow \nu = 1, \ldots, 6).$$

Sînt dați nu numai indicii pentru coeficienții diferiți de zero (v. explicația de la tabelul precedent).

Clasele 222, *mm*2, *mmm* (20 comp.): 111, 112, 113, 122, 123, 133, 144, 155, 166, 222, 223, 233, 244, 255, 266, 333, 344, 355, 366, 456.

Clasele 32, 3*m*, $\bar{3}m$ (14 comp.) 111, 112, 113, 114, 122 = 111 + 112 — — 222, 123, 124, 133, 134, 144, 155, 156 = 1/2 (114 + 3·124), 166 = — 1/4 (2·111 + 112 — 3·222), 222, 223 = 113, 224 = — 114 — 2·124, 233 = 133, 234 = —134, 244 = 155, 255 = 144, 256 = 1/2 (114 — 124), 266 = 1/4 (2·111 — — 112 — 222), 333, 344 = 355, 356 = 134, 366 = 1/2 (113 — 123), 444 = — — 455, 456 = —1/2 (144 — 155), 466 = 124.

Clasele 422, 4*mm*, $\bar{4}2m$, 4/*mmm* (12 comp.): aceiași coeficienți ca și în clasele 222, *mm*2, *mmm*, însă legați prin relațiile: 122 = 112, 222 = 111, 223 = 113, 233 = 133, 244 = 155, 255 = 144, 266 = 166, 344 = 355.

Clasele 432, $\bar{4}3m$, *m*3*m* (6 comp.): 111 = 222 = 333, 112 = 113 = 122 = = 133 = 223 = 233, 123, 144 = 255 = 366, 155 = 166 = 244 = 266, = 334 = = 355, 456.

Clasele ∞∞, ∞∞*m* (3 comp.): sînt diferite de zero aceleași componente ca și în clasele 432, $\bar{4}3m$, *m*3*m*, fiind însă legate prin relațiile suplimentare: 144 = = 1/2 (122 — 123), 155 = 1/4 (111 — 112), 456 = 1/8 (111 — 3·112 + 2·123).

Tabelul E.25

$[V^2][[V^2]^2]$ — tensorul de rangul șase, q, simetric în raport cu prima, a doua și a treia pereche de indici precum și în raport cu permutarea perechii a doua cu a treia, pentru cîteva clase cristalografice și cîteva clase limită: $q_{ijklmn} = q_{jiklmn} = q_{ijlkmn} = q_{ijklnm} = q_{ijmnkl}$

Pentru celelalte clase, v. Vedam și Srinivasan (1967).
Sînt dați coeficienții $q_{\lambda\mu\nu}$, legați de componentele q_{ijklmn} prin regulile de recalculare

$$q_{\lambda\mu\nu} = q_{ijklmn}\ (ij \leftrightarrow \lambda,\ kl \leftrightarrow \mu,\ mn \leftrightarrow \nu = 1, \ldots, 6).$$

Sînt cuprinși numai indicii pentru componentele diferite de zero (v. explicațiile de la tabelul E.23).

Clasele 222, *mm*2, *mmm* (39 comp.): 111, 112, 113, 122, 123, 133, 144, 155, 166, 211, 212, 213, 222, 223, 233, 244, 255, 266, 311, 312, 313, 322, 323, 333, 344, 355, 366, 414, 424, 456, 515, 525, 535, 546, 616, 626, 636, 645.

Clasele 32, $3m$, $\bar{3}m$ (26 comp.) : 111, 112, 113, 114, 122 = 111 + 211 − 222, 123, 124, 133, 134, 144, 155, 156 = 1/2(114 + 124 + 2·214), 166 = − 1/4 (2·111 + 2·112 − 211 − 3·222), 211, 212 = 111 + 112 − 222, 213 = 123, 214, 222, 223 = 113, 224 = − 114 − 124 − 214, 233 = 133, 234 = − 134, 244 = 155, 255 = 144, 256 = 1/2 (114 − 124), 266 = 1/2 (2·111 − 2·112 + 211 − 222), 311, 312, 313, 314, 322 = 311, 323 = 313, 324 = − 314, 333, 344 = 355, 356 = 314, 366 = 1/2 (311 − 312), 411, 412, 413, 414, 422 = −411 −2·412, 423 = −413, 424, 434, 444 = −455, 456 = 1/2 (424 − 414), 466 = 412, 516 = 1/2 (411 + 3·412), 525 = 414, 526 = 1/2 (411 − 412), 535 = 413, 545 = − 444, 546 = 1/2 (424 − 414), 615 = 1/2 (114 + 2·124), 616 = − 1/4 (2·111 + 211 − 3·222), 625 = 1/2 (114 − 214), 626 = 1/4 (2.111 − 222), 635 = 134, 636 = 1/2 (113 − 123), 645 = − 1/2 (144 − 155), 646 = 1/2 (124 + 214).

Clasele 422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$ (22 comp.) : aceiași coeficienți ca și în clasele 222, $mm2$, mmm, însă legați prin relațiile : 211 = 122, 212 = 112, 213 = 123, 222 = 111, 223 = 113, 233 = 133, 244 = 155, 255 = 144, 266 = 166, 322 = 311, 323 = 313, 344 = 355, 515 = 424, 525 = 414, 535 = 434, 546 = 456, 616 = 626.

Clasele 432, $\bar{4}3m$, $m3m$ (9 comp.) : 111 = 222 = 333, 112 = 113 = 212 = 223 = 313 = 323, 122 = 133 = 211 = 233 = 311 = 322, 123 = 213 = 312, 144 = 255 = 366, 155 = 166 = 244 = 266 = 344 = 355, 414 = 525 = 636, 424 = 434 = 515 = 535 = 616 = 626, 456 = 546 = 645.

Clasele $\infty\infty$, $\infty\infty n$ (4 comp.) : egalitățile precedente, completate cu relațiile : 144 = 1/2 (122 − 123), 155 = 1/4 (111 − 2·112 + 122), 414 = 1/2(112−123), 424=1/4 (111−122), 456=1/8 (111−2·112 − 122 + 2·123).

F. FORMA CONTRASĂ DE SCRIERE A TENSORILOR

În fizica teoretică a cristalelor sîntem adesea nevoiți să lucrăm cu tensori de rangul doi simetrici (cu simetria internă $[V^2]$). Dintre aceștia fac parte tensorii deformărilor și ai tensiunilor precum și mulți tensori de material. Legăturile dintre acești tensori sînt exprimate de diferiți tensori de material de rangul patru, șase și de rang și mai înalt, care, cu toată diferența dintre ei, au o proprietate comună : toți sînt simetrici în raport cu perechile de indici, adică au simetria internă $[V^2]^2$, $[V^2]^3$ etc. Cu toate că se pot efectua calcule cu astfel de tensori utilizînd regulile obișnuite ale algebrei tensoriale, s-a dovedit mai comodă utilizarea unor metode speciale de calcul. Aceste metode se bazează pe faptul că o pereche de indici notați cu litere latine, i, $j = 1, 2, 3$, se înlocuiesc cu un indice notat cu literă grecească, λ, care capătă valori de la 1 la 6 (dacă indicii i și j se pot permuta, ei formează împreună 6 combinații diferite). În acest caz, numărul indicilor se micșorează de două ori (ca și cum s-ar micșora de două ori rangul tensorului); este adevărat că acest fapt este compensat de creșterea numărului de valori pe care le capătă fiecare indice. Existența unei simetrii interne suplimentare a tensorilor, adică

posibilitatea de interschimbare a locurilor celorlalte perechi de indici, nu împiedică utilizarea acestei metode; prin urmare, ea poate fi utilizată şi în cazul tensorilor de tipul $[[V^2]^2]$, $[V^2]\,[[V^2]^2]$, $[[V^2]^3]$ şi altora asemănători. Mai mult decît atît, printr-o modificare adecvată, metoda este valabilă şi pentru tensorii de forma $V[V^2]$, $V[[V^2]^2]$ ş.a.

În cele ce urmează, metoda este formulată pe părţi; fiecare parte se referă la un anumit loc al cursului principal, pentru înţelegerea căruia este ea necesară.

Pentru § 51. Tensori ε şi σ. Vom înlocui perechea de indici ij cu indicele λ, conform schemei

$$\begin{array}{ccccccc} ij = & 11 & 22 & 33 & 23 & 31 & 12 \\ \lambda = & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{array} \tag{F.1}$$

În continuare vom considera că indicii notaţi cu litere greceşti, λ, μ, ν, $\varkappa$, capătă valorile 1, ..., 6, fiind legaţi de perechile de indici notaţi cu litere latine, ij, kl etc. prin relaţiile (F.1).

Trecerea de la perechea de indici (să zicem ij), la un singur indice (λ) pentru tensorii ε şi σ se realizează în diferite moduri. Mărimile ε_λ sînt definite, de obicei, prin relaţiile

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_{11},\quad \varepsilon_2 = \varepsilon_{22},\quad \varepsilon_3 = \varepsilon_{33},$$

$$\varepsilon_4 = 2\varepsilon_{23},\quad \varepsilon_5 = 2\varepsilon_{31},\quad \varepsilon_6 = 2\varepsilon_{12},$$

care sînt reunite în formula

$$\varepsilon_\lambda = \begin{cases} \varepsilon_{ij}\ (ij \leftrightarrow \lambda = 1,\ 2,\ 3), \\ 2\varepsilon_{ij}\ (ij \leftrightarrow \lambda = 4,\ 5,\ 6). \end{cases} \tag{F.2}$$

Relaţiile care leagă pe ε_λ de ε_{ij} pot fi scrise şi în forma

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\varepsilon_\lambda}{2 - \delta_{ij}}\,. \tag{F.3}$$

Mărimile corespunzătoare pentru tensorul tensiunilor, σ^λ vor fi notate cu indice superior, deoarece ele sînt definite prin alte relaţii, şi anume,

$$\sigma^1 = \sigma_{11},\quad \sigma^2 = \sigma_{22},\quad \sigma^3 = \sigma_{33},$$

$$\sigma^4 = \sigma_{23},\quad \sigma^5 = \sigma_{31},\quad \sigma^6 = \sigma_{12}.$$

Aceste relații sînt reunite în formula

$$\sigma^{\lambda} = \sigma_{ij} \; (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots, 6). \tag{F.4}$$

În cele ce urmează, la mărimile cu un singur indice literă grecească, care se obțin din componentele unui tensor de rangul doi, după regula (F.2), vom scrie indicele jos, iar la cele care se formează după regula (F.4), sus.

În teoria elasticității cristalelor un rol important îl joacă suma $\sigma_{ij}\,\varepsilon_{ij}$. Notațiile introduse permit scrierea ei în forma

$$\sigma_{ij}\,\varepsilon_{ij} = \sigma^{\lambda}\,\varepsilon_{\lambda}, \tag{F.5}$$

în care, se subînțelege, însumarea se face în raport cu indicii litere grecești, care se repetă, și care se află la niveluri diferite. Pentru satisfacerea egalității (F.5), deosebirea dintre regulile (F.2) și (F.4) este esențială; dacă mărimile care corespund ambilor tensori ar fi formate după aceeași regulă, fie (F.2), fie (F.4), atunci egalitatea (F.5) nu ar fi valabilă. Desigur, s-ar putea trece la indicii litere grecești pentru toți tensorii simetrici de rangul doi, S, și anume astfel

$$S_{\lambda} = \begin{cases} S_{ij} \text{ pentru } ij \leftrightarrow \lambda = 1,\ 2,\ 3, \\ \sqrt{2}\, S_{ij} \text{ pentru } ij \leftrightarrow \lambda = 4,\ 5,\ 6. \end{cases} \tag{F.6}$$

În acest caz ar fi valabilă și relația (F.5), o asemenea definire fiind în multe privințe mai comodă. Trecerea însă de la regulile (F.2) și (F.4) la regula (F.6) ar necesita recalcularea valorilor tabelate ale coeficienților elastici și ale altor coeficienți, făcînd astfel dificilă utilizarea literaturii existente; din această cauză, vom folosi, în continuare, modul de notare unanim acceptat, în ciuda neajunsurilor sale evidente.

La trecerea la „noul" sistem de coordonate, construit pe baza $e_{i'} = c_{i'k}\,e_k$, componentele S_{kl} ale oricărui tensor simetric de rangul doi, S, se transformă după legea

$$S_{i'j'} = c_{i'k}\,c_{j'l}\,S_{kl}. \tag{F.7}$$

Mărimile ε_{μ} și σ^{μ} suferă și ele următoarele transformări liniare

$$\varepsilon_{\lambda'} = T^{\mu}_{\lambda'}\,\varepsilon_{\mu}, \tag{F.8}$$

$$\sigma^{\lambda'} = Q^{\lambda'}_{\mu}\,\sigma^{\mu}. \tag{F.9}$$

Aceste transformări sînt scrise aici astfel încît indicii liberi, care sînt la fel, să se afle şi la acelaşi nivel, însumarea făcîndu-se în raport cu indicii care se află la niveluri diferite. Ele sînt determinate de cerinţa ca în noul sistem de coordonate mărimile $\varepsilon_{\lambda'}$ şi $\sigma^{\lambda'}$ să fie legate de componentele tensorilor corespunzători prin aceleaşi reguli, (F.2) şi (F.4), ca şi în sistemul vechi. Transcriind toţi termenii din formulele (F.7) şi înlocuind componentele $S_{i'j'}$ şi S_{kl} într-un caz cu mărimile $\varepsilon_{\lambda'}$ şi ε_{μ}, după regula (F.2), iar în celălalt caz cu mărimile $\sigma^{\lambda'}$ şi σ^{μ}, după regula (F.4), obţinem elementele matricelor P şi Q

$P^{\mu}_{\lambda'}$	1	2	3	4	5	6
1′	$c^2_{1'1}$	$c^2_{1'2}$	$c^2_{1'3}$	$c_{1'2}c_{1'3}$	$c_{1'3}c_{1'1}$	$c_{1'1}c_{1'2}$
2′	$c^2_{2'1}$	$c^2_{2'2}$	$c^2_{2'3}$	$c_{2'2}c_{2'3}$	$c_{2'3}c_{2'1}$	$c_{2'1}c_{2'2}$
3′	$c^2_{3'1}$	$c^2_{3'2}$	$c^2_{3'3}$	$c_{3'2}c_{3'3}$	$c_{3'3}c_{3'1}$	$c_{3'1}c_{3'2}$
4′	$2c_{2'1}c_{3'1}$	$2c_{2'2}c_{3'2}$	$2c_{2'3}c_{3'3}$	$c_{2'2}c_{3'3}+c_{2'3}c_{3'2}$	$c_{2'3}c_{3'1}+c_{2'1}c_{3'3}$	$c_{2'1}c_{3'2}+c_{2'2}c_{3'1}$
5′	$2c_{3'1}c_{1'1}$	$2c_{3'2}c_{1'2}$	$2c_{3'3}c_{1'3}$	$c_{3'2}c_{1'3}+c_{3'3}c_{1'2}$	$c_{3'3}c_{1'1}+c_{3'1}c_{1'3}$	$c_{3'1}c_{1'2}+c_{3'2}c_{1'1}$
6′	$2c_{1'1}c_{2'1}$	$2c_{1'2}c_{2'2}$	$2c_{1'3}c_{2'3}$	$c_{1'2}c_{2'3}+c_{1'3}c_{2'2}$	$c_{1'3}c_{2'1}+c_{1'1}c_{2'3}$	$c_{1'1}c_{2'2}+c_{1'2}c_{2'1}$

$Q^{\lambda'}_{\mu}$	1	2	3	4	5	6
1′	$c^2_{1'1}$	$c^2_{1'2}$	$c^2_{1'3}$	$2c_{1'2}c_{1'3}$	$2c_{1'3}c_{1'1}$	$2c_{1'1}c_{1'2}$
2′	$c^2_{2'1}$	$c^2_{2'2}$	$c^2_{2'3}$	$2c_{2'2}c_{2'3}$	$2c_{2'3}c_{2'1}$	$2c_{2'1}c_{2'2}$
3′	$c^2_{3'1}$	$c^2_{3'2}$	$c^2_{3'3}$	$2c_{3'2}c_{3'3}$	$2c_{3'3}c_{3'1}$	$2c_{3'1}c_{3'2}$
4′	$c_{2'1}c_{3'1}$	$c_{2'2}c_{3'2}$	$c_{2'3}c_{3'3}$	$c_{2'2}c_{3'3}+c_{2'3}c_{3'2}$	$c_{2'3}c_{3'1}+c_{2'1}c_{3'3}$	$c_{2'1}c_{3'2}+c_{2'2}c_{3'1}$
5′	$c_{3'1}c_{1'1}$	$c_{3'2}c_{1'2}$	$c_{3'3}c_{1'3}$	$c_{3'2}c_{1'3}+c_{3'3}c_{1'2}$	$c_{3'3}c_{1'1}+c_{3'1}c_{1'3}$	$c_{3'1}c_{1'2}+c_{3'2}c_{1'1}$
6′	$c_{1'1}c_{2'1}$	$c_{1'2}c_{2'2}$	$c_{1'3}c_{2'3}$	$c_{1'2}c_{2'3}+c_{1'3}c_{2'2}$	$c_{1'3}c_{2'1}+c_{1'1}c_{2'3}$	$c_{1'1}c_{2'2}+c_{1'2}c_{2'1}$

Aceste matrice diferă una de cealaltă numai prin faptul că în matricea Q elementele care se găsesc în pătratul superior din dreapta conţin coeficientul 2, pe cînd în matricea P, acest coeficient conţine elementele care se află în pătratul inferior din stînga. Elementele acestor matrice pot fi exprimate cu ajutorul formulelor

$$\frac{1}{2}\left(c_{i'k}\, c_{j'l} + c_{i'l}\, c_{j'k}\right) = \frac{P^{\mu}_{\lambda'}}{2-\delta_{i'j'}} = \frac{Q^{\lambda'}_{\mu}}{2-\delta_{kl}}, \qquad \text{(F.10)}$$

în care indicele λ' corespunde perechii $i'j'$, iar indicele μ, perechii kl (de comparat cu formulele (F.3)).

La trecerea de la noul sistem de coordonate la cel vechi, $\varepsilon_{\lambda'}$ şi $\sigma^{\lambda'}$ se supun, aşa cum este uşor de verificat, următoarelor transformări liniare

$$\varepsilon_{\mu} = Q_{\mu}^{\lambda'} \varepsilon_{\lambda'}, \tag{F.11}$$

$$\sigma^{\mu} = P_{\lambda'}^{\mu} \sigma^{\lambda'}. \tag{F.12}$$

Compararea acestor formule cu formulele (F.8) şi (F.9) arată că mărimile de tipul ε_{μ} pot fi considerate componentele covariante ale unui vector în spaţiul cu şase dimensiuni, iar mărimile de tipul σ^{μ}, componentele contravariante ale altui vector din acelaşi spaţiu. Diferenţa dintre legile de transformare pentru aceste mărimi — (F. 8) şi (F.11) pentru ε_{μ}, (F.9) şi (F.12) pentru σ^{μ} — arată că baza la care sînt raportate nu este ortonormată (în baza ortonormată într-un spaţiu cu şase dimensiuni, sînt exprimate mărimile constituite din componentele unui tensor simetric de rangul doi, după regula (F.6)).

Pentru § 51. Tensorii c şi s. Conform legii lui Hooke, tensorii **σ** şi **ε** sînt corelaţi prin relaţia liniară

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\, \varepsilon_{kl}, \tag{F.13}$$

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\, \sigma_{kl}, \tag{F.14}$$

unde **c** şi **s** sînt nişte tensori de rangul patru. Înlocuind, după schema (F.1), perechea de indici ij cu indicele λ, iar perechea kl cu indicele μ, se poate scrie

$$\sigma^{\lambda} = c^{\lambda\mu}\, \varepsilon_{\mu}, \tag{F.15}$$

$$\varepsilon_{\lambda} = s_{\lambda\mu}\, \sigma^{\mu}. \tag{F.16}$$

Indicii lui **c** şi ai lui **s** au fost grupaţi după regulile formulate mai sus. Scriind toţi termenii din formulele (F.13) şi (F.15) şi comparîndu-i, obţinem regula de recalculare pentru $c^{\lambda\mu}$

$$c^{\lambda\mu} = c_{ijkl} (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots, 6\,;\ kl \leftrightarrow \mu = 1, \ldots, 6.) \tag{F.17}$$

Făcînd acelaşi lucru cu relaţiile (F.14) şi (F.16), obţinem regula pentru $s_{\lambda\mu}$

$$s_{\lambda\mu} = \begin{cases} s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1,\ 2,\ 3\,;\ kl \leftrightarrow \mu = 1,\ 2,\ 3), \\ 2s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 1,\ 2,\ 3\,;\ kl \leftrightarrow \mu = 4,\ 5,\ 6), \\ 2s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4,\ 5,\ 6\,;\ kl \leftrightarrow \mu = 1,\ 2,\ 3), \\ 4s_{ijkl} & (ij \leftrightarrow \lambda = 4,\ 5,\ 6\,;\ kl \leftrightarrow \mu = 4,\ 5,\ 6). \end{cases} \tag{F.18}$$

Această regulă se poate scrie, prin analogie cu (F.3), sub forma

$$s_{ijkl} = \frac{s_{\lambda\mu}}{(2 - \delta_{ij})(2 - \delta_{kl})}. \tag{F.19}$$

Comparînd formulele (F.18) și (F.2), vedem că fiecare indice inferior, egal cu 4, 5 sau 6, determină o dublare a mărimilor de tipul ε_λ sau $s_{\lambda\mu}$ față de componenta corespunzătoare a tensorului; același lucru ni-l arată și formulele (F.3) și (F.19). Dimpotrivă, formulele (F.17) și (F.4) arată că mărimi de tipul σ^λ sau $c^{\lambda\mu}$ sînt egale cu componentele corespunzătoare ale tensorului pentru toate valorile indicilor.

Este firesc să presupunem că mărimile $s_{\mu\nu}$, în cazul trecerii la un alt sistem de coordonate, se transformă ca produse a două mărimi de tipul ε_μ, iar $c^{\mu\nu}$ ca produse ale mărimilor de tipul σ^μ, adică faptul că $s_{\mu\nu}$ și $c^{\mu\nu}$ reprezintă, respectiv, componentele covariante și componentele contravariante ale unor tensori de rangul doi, în spațiul cu șase dimensiuni. Și, într-adevăr, nu este greu de verificat că trecerea la noul sistem de coordonate este exprimată prin egalitățile

$$s_{\varkappa'\lambda'} = P^\mu_{\varkappa'} P^\nu_{\lambda'} s_{\mu\nu}, \tag{F.20}$$

$$c^{\varkappa'\lambda'} = Q^{\varkappa'}_\mu Q^{\lambda'}_\nu c^{\mu\nu}, \tag{F.21}$$

iar transformarea inversă — de la noul sistem de coordonate la cel vechi — se realizează după formulele

$$s_{\mu\nu} = Q^{\varkappa'}_\mu Q^{\lambda'}_\nu s_{\varkappa'\lambda'}, \tag{F.22}$$

$$c^{\mu\nu} = P^\mu_{\varkappa'} P^\nu_{\lambda'} c^{\varkappa'\lambda'}. \tag{F.23}$$

Prin urmare, dispunînd corect indicii mărimilor care intră într-o relație tensorială dată, obținem automat regulile de recalculare și formulele de transformare pentru toate mărimile care fac parte din această egalitate (desigur, dacă în relația considerată intră și mărimi ce ne sînt cunoscute). Tocmai în acest scop recurgem aici la această metodă formală.

În unele manuale se recomandă insistent ca pentru raportarea tensorilor coeficienților de elasticitate și coeficienților deformabilității elastice la noile coordonate să se utilizeze formule de forma

$$s_{i'j'k'l'} = c_{i'm}\, c_{j'n}\, c_{k'p}\, c_{l'q}\, s_{mnpq} \tag{F.24}$$

însă risipa nejustificat de mare de termeni în fiecare dintre ele (81 termeni) îngreuiază calculele, constituind totodată o sursă de erori. Formulele (F.20)—(F.23) sînt probabil mai comode: ele

conţin mai puţini termeni (în total 36), întrunind tocmai acei coeficienţi de elasticitate şi de deformabilitate elastică, care sînt daţi în tabele.

Cu toate că, în principiu, fiecare tensor s-ar putea reprezenta atît prin coeficienţi covarianţi, cît şi prin coeficienţi contravarianţi, vom conveni ca deformările ε_λ, coeficienţii de dilatare termică, α_λ, coeficienţii deformabilităţii elastice, $s_{\lambda\mu}$, să-i reprezentăm prin componente covariante, iar tensiunile, σ^λ, coeficienţii de termoelasticitate, β^λ, coeficienţii de elasticitate, $c^{\lambda\mu}$, prin componente contravariante. Această convenţie permite să se scrie toţi indicii la un singur nivel, cu toate că acest lucru este mai puţin comod. În textul principal al cărţii toţi indicii sînt scrişi pe un singur nivel, cel inferior, deoarece această formă tradiţională de scriere se utilizează în aproape întreaga literatură de cristalofizică existentă. Dimpotrivă, în această anexă indicii covarianţi au fost plasaţi jos, iar cei contravarianţi sus, fiind respectată cu stricteţe regula ca însumarea să se facă în raport cu indicii litere greceşti, care se află obligatoriu la niveluri diferite. Poziţia pe nivelul de sus sau cel de jos al indicilor determină, după cum s-a arătat mai înainte, raportul dintre mărimea dată şi componentele tensoriale corespunzătoare precum şi legea de transformare a acestora, la schimbarea sistemului de coordonate.

Pentru § 52. Matricele P şi Q pentru o rotaţie în jurul axei X_3. Unei rotaţii a sistemului de coordonate cartezian, cu un unghi φ în jurul axei X_3, îi corespunde, după cum se ştie (v. §17), matricea cosinuşilor

$$\|c_{i'k}\| = \left\|\begin{matrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}\right\|. \tag{F.25}$$

Substituind elementele ei în formula (F.10) sau direct în expresiile explicite ale matricelor P şi Q prin $c_{i'k}$, vom găsi că matricea P, pentru o rotaţie a sistemului de coordonate în jurul axei X_3 cu unghiul φ, are forma

$$\| P^{\lambda'}_{\mu} \| = \left\|\begin{matrix} \cos^2\varphi & \sin^2\varphi & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\sin 2\varphi \\ \sin^2\varphi & \cos^2\varphi & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}\sin 2\varphi \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ -\sin 2\varphi & \sin 2\varphi & 0 & 0 & 0 & \cos 2\varphi \end{matrix}\right\|, \tag{F.26}$$

matricea Q deosebindu-se de matricea P numai prin aceea că coeficienţii 1/2 se află nu în colţul superior drept, ci în cel inferior stîng.

Pentru § 53. Modulul lui Young, E (q), şi modulul de forfecare, G(p, q). Şi din produsele dintre componentele unui vector se pot forma tot nişte mărimi de tipul ε_λ sau σ^λ. Într-adevăr, produsele posibile a două componente ale aceluiaşi vector (să zicem $\boldsymbol{q}$) sînt componentele unui tensor simetric de rangul doi, $\boldsymbol{qq}$

$$(\boldsymbol{qq})_{ij} = q_i q_j.$$

Trecînd de la perechea de indici, $i, j = 1, 2, 3$, la un singur indice, $\lambda = 1, \ldots, 6$, componentele diadei $\boldsymbol{qq}$ se pot scrie atît sub formă de componente covariante ale unui vector cu şase dimensiuni,

$$(\boldsymbol{qq})_\lambda = \begin{cases} q_i\, q_j \text{ pentru } ij \leftrightarrow \lambda = 1,\ 2,\ 3, \\ 2q_i q_j \text{ pentru } ij \leftrightarrow \lambda = 4,\ 5,\ 6, \end{cases} \tag{F.27}$$

cît şi în formă de componente contravariante ale lui,

$$(\boldsymbol{qq})^\lambda = q_i\, q_j\ (ij \leftrightarrow \lambda = 1, \ldots, 6). \tag{F.28}$$

Care anume dintre aceste forme este recomandată într-un caz sau altul depinde de tipul mărimii ce trebuie înmulţită. Dacă se calculează modulul Young,

$$E(\boldsymbol{q}) = (s_{ijkl}\, q_i\, q_j\, q_k\, q_l)^{-1},$$

atunci înmulţirea se face cu componentele covariante, $s_{\lambda\mu}$; în mod corespunzător, mărimea $\boldsymbol{qq}$ trebuie să fie reprezentată prin componentele contravariante $(\boldsymbol{qq})^\lambda$, deoarece indicii de însumare se află obligatoriu la niveluri diferite. Astfel,

$$E^{-1}(\boldsymbol{q}) = s_{\lambda\mu}(\boldsymbol{qq})^\lambda(\boldsymbol{qq})^\mu. \tag{F.29}$$

Vom utiliza modul de scriere de aici numai la tensorii simetrici. Din produsele componentelor a doi vectori diferiţi (să zicem $\boldsymbol{p}$ şi $\boldsymbol{q}$) se pot forma componentele unui tensor simetric de rangul doi

$$\frac{1}{2}\ (\boldsymbol{pq} + \boldsymbol{qp})_{ij} = \frac{1}{2}(p_i\, q_j + q_i\, p_j).$$

Mai departe, ca şi în cazul precedent, ele pot fi scrise în oricare dintre următoarele forme

$$\frac{1}{2}(p\,q+q\,p)_\lambda=\begin{cases}p_i\,q_j & (ij\leftrightarrow\lambda=1,\ 2,\ 3),\\ p_i\,q_j\ +q_i\,p_j & (ij\leftrightarrow\lambda=4,\ 5,\ 6);\end{cases}\qquad (F.30)$$

$$\frac{1}{2}(p\,q\ +q\,p)^\lambda=\frac{1}{2}(p_i\,q_j\ +q_i\,p_j)\quad (ij\leftrightarrow\lambda=1,\ \ldots,\ 6).\qquad (F.31)$$

Pentru calcularea modulului de forfecare, $G(p,\ q)$, folosim componentele contravariante $1/2(pq\ +qp)^\lambda$, deoarece valorile tabelate, $s_{\lambda\mu}$, sînt covariante. Ca urmare a faptului că tensorul s_{ijkl} este simetric în raport cu prima şi cu cea de-a doua pereche de indici,

$$G^{-1}(p,\ q)=4s_{ijkl}p_iq_jp_kq_l=s_{ijkl}(p_iq_j\ +q_ip_j)\ (p_kq_l\ +q_lp_k).\qquad (F.32)$$

De aici, obţinem din nou relaţia

$$G^{-1}(p,\ q)=s_{\lambda\mu}(pq\ +qp)^\lambda(pq\ +pq)^\mu.\qquad (F.33)$$

Pentru § 56. Viteza undelor elastice în cristale. Viteza unei unde elastice longitudinale,

$$v=\sqrt{\frac{1}{\rho}\,c_{ijkl}m_i\ m_jm_km_l}\ ,\qquad (F.34)$$

poate fi scrisă, evident, în forma

$$v=\sqrt{\frac{1}{\rho}\,c^{\lambda\mu}(mm)_\lambda(mm)_\mu}\ .\qquad (F.35)$$

Faptul că pentru coeficienţii de elasticitate indicii sînt scrişi sus, ne obligă ca pentru diada *mm* să-i luăm jos, de unde şi rezultă regula de recalculare

$$(mm)_\lambda=\begin{cases}m_im_j & (ij\leftrightarrow\lambda=1,\ 2,\ 3),\\ 2m_im_j & (ij\leftrightarrow\lambda=4,\ 5,\ 6).\end{cases}\qquad (F.36)$$

În cazul general, viteza unei unde elastice este

$$v=\sqrt{\frac{1}{\rho}\,c_{ijkl}\ m_i\ p_j\ m_k\ p_l}.\qquad (F.37)$$

Vom introduce tensorul simetric de rangul doi,

$$\mathbf{L} = \frac{1}{2}(mp + pm).$$

Evident,

$$v = \sqrt{\frac{1}{\rho} c_{ijkl} L_{ij} L_{kl}} = \sqrt{\frac{1}{\rho} c^{\lambda\mu} L_\lambda L_\mu}, \tag{F.38}$$

aplicînd următoarele reguli de calcul

$$L_\lambda = \begin{cases} L_{ij} = m_i p_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 1, 2, 3), \\ 2L_{ij} = m_i p_j + p_i m_j & (ij \leftrightarrow \lambda = 4, 5, 6). \end{cases} \tag{F.39}$$

Pentru § 58. Coeficienţii piezoelectrici, d. Ecuaţiile teorie efectului piezoelectric,

$$D_i = \varkappa_{ij} E_j + 4\pi d_{i\mu} \sigma^\mu, \quad \varepsilon_\lambda = d_{j\lambda} E_j + s_{\lambda\mu} \sigma^\mu, \tag{F.40}$$

ne dau regulile de calcul pentru coeficienţii piezoelectrici. Remarcăm că indicii notaţi cu litere latine se scriu, ca şi pînă acum, pe un singur nivel, regulile de calcul,

$$d_{i\mu} = \begin{cases} d_{ikl} & (kl \leftrightarrow \mu = 1, 2, 3), \\ 2d_{ikl} & (kl \leftrightarrow \mu = 4, 5, 6), \end{cases} \tag{F.41}$$

depinzînd numai de indicii notaţi cu litere greceşti. Formulele de transformare pentru mărimile $d_{i\mu}$ sînt următoarele

$$d_{i'\mu'} = c_{i'j} P^\nu_{\mu'} d_{j\nu}, \quad d_{j\nu} = c_{i'j} Q^{\mu'}_\nu d_{i'\mu'}. \tag{F.42}$$

Pentru §§ 61, 62. Coeficienţii piezoelectrici, e. Ecuaţiile teoriei efectului piezoelectric, de forma,

$$D_i = \varkappa_{ij} E_j + 4\pi e^\mu_i \varepsilon_\mu, \quad \sigma^\lambda = - e^\lambda_j E_j + c^{\lambda\mu} \varepsilon_\mu, \tag{F.43}$$

conduc, pentru coeficienţii e^μ_i, la următoarele reguli de calcul

$$e^\mu_i = e_{ikl} \quad (kl \leftrightarrow \mu = 1, \ldots, 6) \tag{F.44}$$

şi la formule de transformare de forma

$$e^{\mu'}_{i'} = c_{i'j} Q^{\mu'}_\nu e^\nu_j, \quad e^\nu_j = c_{i'j} P^\nu_{\mu'} e^{\mu'}_{i'}. \tag{F.45}$$

Prin acelaşi procedeu se pot obţine regulile de calcul şi formulele de transformare şi pentru alţi coeficienţi, care caracterizează proprietăţile piezoelectrice ale cristalelor.

Pentru § 74. Tensorii prin care se exprimă efectele neliniare. Scrierea dezvoltării (74.3) cu indici covarianţi şi cu indici contravarianţi,

$$\widetilde{D}_i = \widetilde{\varkappa}_{ik} E_k + d_{i\mu} \sigma^{\mu} + \widetilde{R}_{ikl} E_k E_l + 2P_{ik\mu} E_k \sigma^{\mu} + Q_{i\mu\nu} \sigma^{\mu} \sigma^{\nu}, \tag{F.46, a}$$

$$\varepsilon_{\lambda} = d_{k\lambda} E_k + s_{\lambda\mu} \sigma^{\mu} + P_{kl\lambda} E_k E_l + 2Q_{k\lambda\mu} E_k \sigma^{\mu} + L_{\lambda\mu\nu} \sigma^{\mu} \sigma^{\nu}, \tag{F.46, b}$$

determină relaţiile dintre $P_{ik\mu}$, $Q_{i\mu\nu}$, $L_{i\mu\nu}$ şi componentele tensorilor corespunzători din formulele (74.4): pentru realizarea egalităţii, acestea din urmă trebuie înmulţite cu 2^m, m fiind numărul cifrelor de patru, de cinci sau de şase dintre indicii λ, μ, ν. Analog se definesc şi tensorii care exprimă elasticitatea neliniară — v. formulele (74.5)—(74.7). Cu ajutorul indicilor covarianţi şi al celor contravarianţi, ele se scriu sub forma

$$\sigma^{\lambda\mu} = \sigma_0^{\lambda\mu} + g^{\lambda\mu\nu} \sigma^{\nu}, \tag{F.47}$$

$$\sigma^{\lambda\mu} = \sigma_0^{\lambda\mu} + C^{\lambda\mu\nu} \varepsilon_{\nu}, \tag{F.48}$$

de unde rezultă şi regulile de recalculare: $C^{\lambda\mu\nu}$ coincide totdeauna cu C_{ijklmn}, iar

$$g_{\nu}^{\lambda\mu} = \begin{cases} g_{ijklmn} & (mn \leftrightarrow \nu = 1,\ 2,\ 3), \\ 2g_{ijklmn} & (mn \leftrightarrow \nu = 4,\ 5,\ 6). \end{cases}$$

Pentru § 75. Coeficienţii piezorezistivi şi coeficienţii elastorezistivi. Formulele (75.3) şi (75.5) pot fi scrise sub forma

$$E_i = \rho_{ik}^0(\delta_{kl} + \Pi_{\mu}^{\lambda} \sigma^{\mu}) j_l, \tag{F.49}$$

$$E_i = \rho_{ik}^0(\delta_{kl} + m^{\lambda\mu} \varepsilon_{\mu}) j_l. \tag{F.50}$$

În acest caz se presupune că indicele λ coincide cu perechea de indici kl, scrierea lui sus rezultînd din faptul că j_k şi j_l sînt componente ale unui vector (dacă regulile de recalculare ar corespunde scrierii jos a indicelui λ, formulele (F.49) şi (F.50) ar da o valoare dublă a corecţiilor piezorezistive pentru j_k în cazurile în care $l \neq k$). Poziţia indicilor μ este determinată de regulile generale de recalculare pentru σ^{μ} şi ε_{μ}.

Formula (F.50) duce la reguli de recalculare şi la formule de transformare pentru $m^{\lambda\mu}$, care corespund exact cu formulele obţinute mai înainte pentru coeficienţii de elasticitate $c^{\lambda\mu}$ — v. formulele (F.17), (F.21) şi (F.23). Pentru coeficienţii piezorezistivi, Π^{μ}_{λ}, relaţia (F.49) duce la regulile de calcul (75.7), cu care corespund formulele de calcul asemănătoare

$$\Pi^{\lambda'}_{\mu'} = Q^{\lambda'}_{\nu} P^{\varkappa}_{\mu'} \Pi^{\nu}_{\varkappa}, \quad \Pi^{\nu}_{\varkappa} = P^{\nu}_{\lambda'} Q^{\mu'}_{\varkappa} \Pi^{\lambda'}_{\mu'}. \qquad \text{(F.51)}$$

Pentru § 77. Coeficienţii piezooptici, coeficienţii elastooptici şi coeficienţii Kerr. Pentru scrierea ecuaţiilor efectului piezooptic cu indici covarianţi şi cu indici contravarianţi este foarte importantă alegerea regulilor de recalculare pentru variaţiile indicatricei optice. Mai răspîndite sînt regulile de calcul care corespund formei ζ^{λ} — ele sînt utilizate, în particular, de către Nye (1967). Lor le corespund ecuaţiile

$$\zeta^{\lambda} = \pi^{\lambda}_{\mu}\ \sigma^{\mu}, \qquad \text{(F.52)}$$

$$\zeta^{\lambda} = p^{\lambda\mu}\ \varepsilon_{\mu}. \qquad \text{(F.53)}$$

Regulile de recalculare pentru π^{λ}_{μ} sînt la fel ca şi cele pentru coeficienţii Π^{λ}_{μ}. Din această cauză, coeficienţilor π^{λ}_{μ} le sînt aplicabile şi formulele de transformare (F.51). Poziţia indicilor la coeficienţii $p^{\lambda\mu}$ este aceeaşi ca şi la coeficienţii elastorezistivităţii, $m^{\lambda\mu}$, şi la coeficienţii de elasticitate, $c^{\lambda\mu}$. Aceasta conduce la regulile de recalculare (F.17) şi la formulele de transformare (F.21) şi (F.23).

Efectul Kerr se studiază în acelaşi mod. Deoarece pentru diada $\boldsymbol{EE}$ se ia forma

$$(\boldsymbol{EE})^{\mu} = E_k\ E_l\ \ (kl \leftrightarrow \mu = 1, \ldots, 6), \qquad \text{(F.54)}$$

coeficienţilor Kerr, K^{λ}_{μ}, li se aplică aceleaşi reguli de recalculare şi formule de transformare ca şi coeficienţilor piezooptici, π^{λ}_{μ}.

Pentru § 77. Coeficienţii electrooptici. Regulile de recalculare aplicate lui ζ^{λ}, în cazul variaţiei indicatricei optice, duc la scrierea ecuaţiilor efectului electrooptic (77.16) sub forma

$$\zeta^{\lambda} = r^{\lambda}_{k}\, E_k \qquad \text{(F.55)}$$

şi, respectiv, la regulile de calcul pentru coeficienţii electrooptici (77.18). Formulele de transformare pentru r^{λ}_{k} sînt analoage formulelor (F.45) pentru coeficienţii piezoelectrici, e^{μ}_{i}

$$r^{\lambda'}_{k'} = Q^{\lambda'}_{\mu}\ c_{k'l}\ r^{\mu}_{l}, \quad r^{\mu}_{l} = P^{\mu}_{\lambda'}\ c_{k'l}\ r^{\lambda'}_{k'}. \qquad \text{(E.56)}$$

NOTAȚIILE MAI IMPORTANTE FOLOSITE IN TEXT

Simbolurile Miller sau simbolurile Bravais ale planurilor sau ale fețelor sînt puse în paranteze rotunde, (...), simbolurile direcțiilor sau ale muchiilor, în paranteze drepte, [...], simbolurile formei simple sau ale seturilor de planuri de simetrie echivalente, în acolade, {...}, ale unui fascicul de direcții echivalente, în paranteze de tipul ⟨...⟩. Semnul minus dintr-un simbol se scrie deasupra cifrei.

Vectorii se notează cu litere aldine cursive ale alfabetului latin, de pildă, $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{V}$.

Tensorii se notează cu litere ale alfabetului latin, aldine, drepte, și cu litere grecești, aldine, de exemplu, $\mathbf{s}$, $\mathbf{T}$, $\boldsymbol{\kappa}$.

Produsul scalar se notează cu punct, ($\cdot$), iar cel vectorial cu semnul ori ($\times$).

δ^{α}_{β}, δ_{ij} — tensorul lui Kronecker

$\delta^{\alpha\beta\gamma}$, $\delta_{\alpha\beta\gamma}$, δ_{ijk} — pseudotensorul Levi-Civita

$\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, $\boldsymbol{a}_3$ — vectorii fundamentali ai rețelei

$\boldsymbol{a}^1$, $\boldsymbol{a}^2$ $\boldsymbol{a}^3$ — vectorii fundamentali ai rețelei reciproce

$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$ — versorii unui sistem de coordonate cartezian (de obicei, cristalofizic)

X, Y, Z — axele unui sistem de coordonate cristalografic

X_1, X_2, X_3 — axele unui sistem de coordonate cartezian (de obicei, cristalofizic)

$P^{\beta}_{\alpha'}$, $Q^{\alpha'}_{\beta}$, $P^{\mu}_{\lambda'}$, $Q^{\lambda'}_{\mu}$ — matricele transformării coordonatelor rectilinii generale

$c_{i'j}$ — matricea transformării coordonatelor carteziene (matricea cosinușilor)

$r_{i'j}$ — matricea rotației coordonatelor carteziene

$\boldsymbol{E}$ — vectorul intensitate a cîmpului electric

$\boldsymbol{H}$ — vectorul intensitate a cîmpului magnetic

$\boldsymbol{D}$ — vectorul inducție a cîmpului electric

$\boldsymbol{P}$ — vectorul polarizare

$\boldsymbol{\kappa}$, $\varkappa_{ij}$ — tensorul permitivității dielectrice

$\boldsymbol{\eta}$, η_{ij} — tensorul impermitivității dielectrice

$\boldsymbol{\lambda}$, λ_{ij} — tensorul coeficienților conductibilității termice

$\mathbf{k}$, k_{ij} — tensorul coeficienților difuzabilității

$\boldsymbol{\rho}$, ρ_{ij} — tensorul rezistivității

$\boldsymbol{m}$ — vectorul unitar al normalei de undă

$\boldsymbol{s}$ — vectorul unitar al razei

N_o, N_e — indicii de refracție principali ai cristalelor uniaxe

N_1, N_2, N_3 sau N_g, N_m, N_p — indicii de refracție principali ai cristalelor biaxe

n_1, n_2, și n_o, n_e — indicii de refracție pentru o direcție arbitrară de propagare a luminii

χ — caracterul reprezentării (în §§ 47 și 66)

$\boldsymbol{u}$ — vectorul deplasare

$\boldsymbol{\varepsilon}$, ε_{ij}, ε_{λ} — tensorul micilor deformări

$\boldsymbol{\omega}$, ω_{ij} — tensorul micilor rotații

$\mathring{\boldsymbol{\varphi}}$, $\mathring{\varphi}_i$ — vectorul axial al micilor rotații

$\boldsymbol{\sigma}$, σ_{ij}, σ_{λ} — tensorul tensiunilor (în §§ 32 și 76 — tensorul conductibilității electrice)

$\mathbf{\alpha}$, α_{ij} — tensorul dilatării termice (în §§ 26, 27 şi 80 — tensorul susceptibilităţii dielectrice, în §70 — tensorul coeficienţilor termoelectrici)

$\mathbf{s}$, s_{ijkl}, $s_{\lambda\mu}$ — tensorul coeficienţilor deformabilităţii elastice

$\mathbf{c}$, c_{ijkl}, $c_{\lambda\mu}$ — tensorul coeficienţilor de elasticitate

U — energia internă pe unitatea de volum

Φ — potenţialul termodinamic pe unitatea de volum

S — entropia pe unitatea de volum

T — temperatura

C — căldura specifică pe unitatea de volum

$\mathbf{d}$, d_{ijkl}, $d_{i\mu}$ — tensorul coeficienţilor piezoelectrici

x_A, x_a — coordonatele termodinamice generalizate

X_A, X_a — forţele termodinamice generalizate

$\mathbf{\Pi}$, Π_{ijkl}, $\Pi_{\lambda\mu}$ — tensorul coeficienţilor piezorezistivi

$\mathbf{m}$, m_{ijkl}, $m_{\lambda\mu}$ — tensorul coeficienţilor elastorezistivi

J_a — fluxurile generalizate în termodinamica proceselor ireversibile

K_a — forţele conjugate fluxurilor în termodinamica proceselor ireversibile

$\mathfrak{L}_{ab}$ — coeficienţii cinetici

$\mathbf{\pi}$, π_{ijkl}, $\pi_{\lambda\mu}$ — tensorul coeficienţilor piezooptici

$\mathbf{p}$, p_{ijkl}, $p_{\lambda\mu}$ — tensorul coeficienţilor elastooptici

$\mathbf{r}$, r_{ijk}, $r_{\lambda k}$ — tensorul coeficienţilor electrooptici

$\mathbf{K}$, K_{ijkl}, $K_{\lambda\mu}$ — tensorul coeficienţilor Kerr

$\mathbf{\chi}$, χ_{ijk} — tensorul susceptibilităţii dielectrice pătratice

$\mathbf{\theta}$, θ_{ijkl} — tensorul susceptibilităţii dielectrice cubice

G, G_{ij} — pseudotensorul de giraţie

Indicii:

$\alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3$ corespund axelor sistemului cristalografic de coordonate; se pot afla în poziţie superioară sau inferioară,

$i, j, k, l = 1, 2, 3$ corespund unui sistem cartezian de coordonate (de obicei, cristalofizic),

$\lambda, \mu, \nu, \varkappa = 1, \ldots, 6$ permit înlocuirea a doi indici tensoriali cu unul singur; în textul principal (începînd cu capitolul 6) se află în poziţia inferioară, în anexă în poziţia inferioară şi în poziţia superioară,

$A, B, C, D = 0, \ldots, 9$ — în notaţiile forţelor şi coordonatelor termodinamice generalizate, incluzînd temperatura şi entropia, şi corespunzînd matricelor termodinamice (cap. 7),

$a, b, c, d = 1, \ldots, 9$ — în notaţiile forţelor şi coordonatelor generalizate termodinamice, exclusiv temperatura şi entropia, şi corespunzînd matricelor termodinamice (cap. 7 şi § 74),

$a, b, c, d = 1, \ldots, 9$ — în notaţiile fluxurilor, forţelor conjugate lor şi matricelor coeficienţilor cinetici (§76).

Cazurile în care indicii se utilizează în alt sens sau capătă alte valori au fost menţionate în text.

BIBLIOGRAFIE

Aero, E. L., Kuvșinski, E. V. (1960), ,,FTT'', **2**, 1399.

Ahmanov, S. A. (1969), *Nelineinaia optika*, în cartea *Kvantovaia electronika, malenkaia ențiklopediia*, p. 119, Sov. ențiclopediia.

Ahmanov, S. A., Hohlov, R. V. (1964), *Problemî nelineinoi optiki*, VINITI, M.

Agranovici, V. M., Ghinzburg, V. L. (1965), *Kristallooptika s uciotom stranstvennoi dispersii i teoriia eksitonov*, Nauka.

Agranovici, V. M., Ghinzburg, V. L. (1972), ,,JETF'', **63**, 838.

Akivis, M. A., Goldberg, V. V. (1969), *Tenzornoe iscislenie*, Nauka.

Aleksandrov, V. N. (1970), ,,Kristallografiia'', **15**, 996.

Aleksandrov, K. S. (1956), ,,Kristallografiia'', **1**, 718.

Aleksandrov, K. S. (1958), ,,Kristallografiia'', **3**, 620.

Aleksandrov, K. S. (1962), ,,Kristallografiia'', **7**, 735.

Aleksandrov, K. S., Zinenko, V. I., Mihelson, L. M., Sirotin, I. I. (1969), ,,Kristallografiia'', **14**, 327.

Aleksandrov, K. S., Rîjova, T. V. (1961), ,,Kristallografiia'', **6**, 289.

Aleksandrov, K. S., Rîjova, T. V. (1964), ,,Kristallografiia'', **9**, 373.

Ambarțumean, S. A. (1967), *Teoria anizotropnîh plastin*, Nauka.

Andronov, A. A. (1960), ,,Izv. vuzov, Radiotehnika'', **3**, 45.

Astrov, D. N. (1960), ,,JETF'', **38**, 984.

Barkovski, L. M. (1970), ,,Vestn. Belorussk. un-ta, ser. 1'', nr. 2, 42.

Belov, K. P. (1959), *Magnitîe prevrașceniia*, Fizmatghiz.

Belov, K. P., Beleancikova, M. A., Lavitin, R. Z., Nikitin, S. A. (1965), *Redkozemelnîe ferro- i antiferromagnetiki*, Nauka.

Belov, N. V. (1947), *Struktura ionnîh kristallov i metaliceskih faz*, Izd-vo AN SSSR.

Belov, N. V. (1951), *Strukturnaia kristallografiia*, Izd-vo AN SSSR.

Belov, N. V. (1951), a), ,,Tr. In-ta kristallografii AN SSSR'', **6**, 25.

Belov, N. V. (1957), ,,Kristallografiia'', **2**, 678.

Belov, N. V. (1958), ,,Kristallografiia'', **3**, 246.

Belov, N. V. (1962), ,,Mineral.'', sb. Lvovsk. gheol. ob-va, **16**, 41.

Belov, N. V., Klevțova, R. F. (1959), ,,Kristallografiia'', **4**, 289, 473.

Belov, N. V., Neronova, N. N., Smirnova, T. S. (1955), ,,Tr. In-ta kristallografii AN SSSR'', **11**, 33, sau (1957), ,,Kristallografiia'', **2**, 315.

Belov, N. V., Tarhova, T. N. (1956), ,,Kristallografiia'', **1**, 4, 619.

Belov, E. N., Belov, N. V., Șubnikov, A. V. (1948), ,,Dokl. AN SSSR'', **63**, 669.

Berestețki, V. B., Lifșiț, E. M., Pitaevski, L. P. (1968), *Releativistskaia kvantovaia teoriie*, vol. I, Nauka.

Bhagavantam, S. (1966), *Crystal Symetry and Physical Properties*, Acad. Press, Lond. — NY.

Bhagavantam, S., Suryanarayana, D. (1949), ,,Acta crystalogr.'', **2**, 21.

Bhagavantam, S., Venkatarayudu, T. (1959), *Teoriia grupp i eio primenenie k fiziceskim problemam*, IL.

Bir, L. G., Pikus, G. E. (1972), *Simetriia i deformaționnîe effektî v poluprovodnikah*, Nauka.

Birss, R. (1962), ,,Proc. Phys. Soc.'', **79**, 946.

Birss, R. (1964), *Symmetry and Magnetism*, Holland Publ. Co.

Blombergen, N. (1965), *Nonlinear Optics*, W. B. Benjamin, Inc. New York.
Boki, G. B. (1940), ,,Tr. Lab. kristallografii AN SSSR", **2**, 13.
Boki, G. B. (1971), *Kristallohimiia*, Naûka.
Bokut, B. V., Serdiukov, A. N. (1971), ,,JETF", **61**, 1808.
Bokut, B. V., Serdiukov, A. N., Fiodorov, F. I. (1970), ,,Kristallografiia", **15**, 1002.
Boldîrev, A. K. (1934), *Kristallografiia*, Gorgheonefizdat.
Boldîrev, A. K. (1936), ,,Am. Mineral", **21**, 731.
Borisenko, A. I., Tarapov, I. E. (1966), *Vektornîi analiz i naceala tenzornogo iscisleniia*, Vîssaia şkola.
Born, M. (1933), *Optik*, Springer, Berlin.
Born, M., Wolf, E. (1964), *Principles of Optics*, Pergamon Press.
Born, M., Huang, K. (1958), *Dinamiceskaia teoriia kristaliceskih reşetok*, IL.
Borovik-Romanov, A. S. (1959), ,,JETF", **36**, 1954.
Borovik-Romanov, A. S. (1960), ,,JETF", **38**, 1088.
Boyle, L. L., Lawrenson, J. E. (1972), ,,Acta crystallogr.", **A28**, 485, 489.
Bravais, O. (1974), *Izbrannîe naucinîe trudî*, Nauka.
Brewster, D. (1818), ,,Trans. Roy. Soc. Edimb.", **18**, 281.
Brout, R. (1967), *Fazovîe perehodî*, Mir.
Burfoot, J. (1970), *Vvedenie v fiziku segnetoelektriceskih iavlenii*, Mir.
Buerger, M. J. (1965), *Elementary Crystallography*, J. Wiley & Sons.
Buerger, M. J. (1970), *Contemporany Crystallography*, McGraw-Hill Book Co.
Buerger, M. J. (1948), *Riontghenoskaia kristallografiia*, IL.
Burkhardt, J. J. (1947), *Die Bewegungsgruppen der Kristallographie*, Verlag Birkhäuser, Basel.
Butabaev, Ş. M., Sirotin, I. I. (1972), ,,Kristallografiia", **17**, 1181.
Butabaev, Ş. M., Sirotin, I. I. (1973), ,,Kristallografiia", **18**, 195.
Butabaev, Ş. M., Smîslov, I. I. (1971), ,,Kristallografiia", **16**, 796.
Cady, W. (1949), *Piezoelektricestvo i ego prakticeskie primeneniia*, IL.
Chern, M.-J., Phillips, R. A. (1970), ,,J. Opt. Soc. Amer.", **60**, 1230.
Cochran, W., Zia, A. (1968), ,,Phys. stat. solidi", **25**, 273.
Codarcea, A. (1965), *Mineralogie*, vol. I, *Cristalografia*, Ed. didactică şi pedagogică, Bucureşti.
Crystallographic Book List (1965), ed. by H. Megaw, Int. Union of Crystallography.
Curie, M. (1968), *Piotr Kiuri*, Nauka.
Curie, P. (1966), *Izbrannîe trudî*, Nauka.
Delone, B., Padurov, N., Aleksandrov, A. (1934), *Matematiceskie osnovî strukturnogo analiza kristallov*, Gostehizdat.
Delone, B. N., Galiulin, R. V., Ştorghin, M. I. (1974), *Teoriia Brave i eio obobşcente na n-mernîe reşetki*, în lucrarea Brave (1974).
Diurelli, A., Raili, U. (1970), *Vvedenie v fotomehaniku*, Mir.
Ditchbern, R. (1965), *Fiziceskaia optika*, Nauka.
Döring, W. (1958), ,,Ann. Physik [7]", **1**, 104.
Dvořak, V. (1971), ,,Ph s. stat. solidi(b)", **45**, 147.
Dvořak, V., Petzelt, J. (1971), ,,Czech. J. Phys.", **B21**, 1147.
Dzealoşinski, I. E. (1957), ,,JETF", **33**, 807.
Dzealoşinski, I. E. (1959), ,,JEFT", **37**, 881.
Dzealoşinski, I. E. (1964), ,,JETF", **46**, 1420.
Dzealoşinski, I. E. (1964, a), ,,JETF", **47**, 336, 992.
Ehyshima, K., Ogawa, T. (1971), ,,J. Phys. Soc. Japan", **31**, 308.
Escher, M. C. (1961), *The Graphic Work*, Oldbourne Press, Lond.
Fabelinski, I. L. (1965), *Molekulearnoe rasseianie sveta*, Nauka.
Fadeeav, D. K. (1961), *Tablifi osnovnîh unitarnîh predstavlenii fiodorovskih grupp*, Izd-vo AN SSSR.
Farneel, G. W. (1961), ,,Canad. J. Phys.", **39**, 865.
Feinman, R. P., Leighton, R. B., Sands, M. (1969), *Fizica modernă*, Ed. tehnică.
Fieschi, R., Fumi, F. G. (1953), ,,Nuovo Cimento", **10**, 865.
Fiodorov, E. S. (1949), Simmetriia i struktura kristallov, Izd-vo AN SSSR.

Fiodorov, F. I. (1958), Optika anizotropnih sred, Izd-vo AN SSSR.
Fiodorov, F. I. (1959), ,,Optika i spektroskopiia'', **6**, 337.
Fiodorov, F. I. (1959, a), ,,Optika i spektroskopiia'', **6**, 85.
Fiodorov, F. I. (1965), Teoriia uprughih voln v kristallah, Nauka.
Fiodorov, F. I. (1970), ,,Kristallografiia'', **15**, 631, 638.
Flint, E. E. (1956), *Prakticeskoe rukovodstvo po gheometriceskoi kristallografii*, Gosgheoltehizdat.
Fumi, F. G. (1951), ,,Phys. Rev.'', **83**, 1274.
Fumi, F. G. (1952), ,,Acta crystallogr.'', **5**, 44, 691.
Fumi, F. G. (1952, a), ,,Nuovo Cimento'', **9**, 739.
Fumi, F. G. (1952, b), ,,Phys. Rev.'', **86**, 561.
Gaiu, R. J. (1962), *Struktura kristallov, Izbrannie trudi*, Izd-vo AN SSSR.
Gherman, V. L. (1945), ,,Dokl. AN SSSR'', **48**, 95.
Ghinzburg, V. L. (1949), ,,UFN'', **38**, 430.
Goldenblat, I. I. (1969), *Nelineinie problemi teorii uprugosti*, Nauka.
Groot de, S., Masour, P. (1964), *Neravnovesnaia termodinamika*, Mir.
Groth, P. (1897), *Fiziceskaia kristallografiia i vvedenie k izuceniiu kristallograficeskih stvoistv vajneişih soedinenii*, sub redacţia şi cu completările lui Levinsohn-Lessing, Izd-vo K. L. Rikkera, SP6.
Gufan, I. M. (1971), ,,FTT'', **13**, 225.
Gufan, I. M., Sahnenko, V. P. (1972), ,,FTT'', **14**, 1915.
Gufan, I. M., Sahnenko, V. P. (1972, a), ,,JETF'', **63**, 1909.
Gurevici, G. B. (1948), *Osnovi teorii alghebraiceskih invariantov*, Gostehizdat.
Haaze, R. (1967), *Termodinamika neobratimih profesov*, Mir.
Hammermesch, M. (1966), *Teoriia grupp i eio primenenie k fiziceskim problemam*, Mir.
Hanneke, E. G., Green, R. E. (1969), ,,J. Acoust. Soc. Amer.'', **45**, 1367.
Hatkevici, A. G. (1962), ,,Kristallografiia'', **7**, 742.
Hatkevici, A. G. (1962, a), ,,Kristallografiia'', **7**, 916.
Haceaturean, A. G. (1965), ,,Dokl. AN SSSR'', **165**, 1284.
Haceaturean, A. G. (1974), *Teoriia fazovih prevraşcenii i struktura tviordih rastvorov*, Nauka.
Heine, W. (1963), *Teoriia grupp v kvantovoi mehanike*, IL.
Hermann, C. (1934), ,,Zs. Kristallogr.'', **89**, 32.
Hobden, M. V. (1969), „Acta crystallogr.'', **A25**, 633.
Hruška, K., Khogali, A. (1971), ,,Trans. IEEE'', **SU18**, 171.
Iakovlev, I. A. ş.a. (1957), ,,JETF'', **32**, 4; ,,JETF'', **32**, 9; ,,UFN'', **63**, 2; (1956), ,,DAN'', **107**, 5; ,,Kristallografiia'', **1**, 1.
Ianke, E., Emde, F., Lösch, F. (1968), *Speţialnie funkţii*, Nauka.
Iliuşin, A. A. (1971), *Mehanika sploşnoi sredi*, Izd-vo MGU.
Indenbom, V. L. (1959), ,,Kristallografiia'', **4**, 619.
Indenbom, V. L. (1960), ,,Kristallografiia'', **5**, 115.
Indenbom, V. L. (1960, a), ,,Izv. AN SSSR, ser. fiz.'', **24**, 1180.
Indenbom, V. L., Belov, N. V., Neronova, N. N. (1960), ,,Kristallografiia'', **5**, 497.
Indenbom, V. L., Silvestrova, I. M., Sirotin, I. I. (1956), ,,Kristallografiia'', **1**, 599.
International Tables for X-Ray Crystallography (1952), vol. I, II, Birmingham.
Ioffe, A. F. (1932), *Fizika kristallov*, GTTI.
IRE Standards on Piezoelectric Crystals (1949), ,,Proc. IRE'', **37**, 1378; (1957), ,,Proc. IRE'', **45**, 354; (1958), ,,Proc. IRE'', **46**, 765; (1961), ,,Proc. IRE'', **49**, 1162.
Ivanov, N. R., Konstantinova, A. F. (1970), ,,Kristallografiia'', **15**, 490.
Iziumov, I. A., Ozerov, R. P. (1966), *Magnitnaia neitronografiia*, Nauka.
Jahn, H. A. (1949), ,,Acta crystallogr.'', **2**, 33.
Janik, L., Hruška, K. (1970), ,,Czech. J. Phys.'', **B20**, 202.
Jdanov, G. S. (1940), *Osnovi rientghenostrukturnogo analiza*, Gostehizdat.
Jdanov, G. S. (1961), *Fizika tviordogo tela*, Izd-vo MGU.
Jeludev, I.S. (1957), ,,Kristallografiia'', **2**, 207.

Jeludev, I. S. (1964), ,,Kristallografiia", **9**, 501.
Jeludev, I. S. (1968), *Fizika kristalliceskih dielectrikov*, Nauka.
Jeludev. I. S. (1972), *Cristale electrice*, Ed. tehnică, București.
Jeludev, I. S. (1971), ,,Kristallografiia", **16**, 273.
Jeludev, I. S. (1973), *Vvedenie v segnetoelektricestvo*, Atomizdat.
Jeludev, I. S., Șuvalov, L. A. (1956), ,,Kristallografiia", **1**, 681.
Jona, F., Shirane, D. (1965), *Segnetoelektriceskie kristalli*, Mir.
Känzig, W. (1960), *Segnetoelektriki i antisegnetoelektriki*, IL.
Kaplan, I. G. (1969), *Simetriia mnogoelektronnîh sistem*, Nauka.
Karandeev, V. V. (1913), *Kristallooptika*, Izd. Vîsș. jensk. kursov, M.
Karslow, G., Eger, D. (1964), *Teploprovodnost tviordîh tel*, Nauka.
Kittel, Ch. (1972), *Introducere în fizica corpului solid*, Ed. tehnică, București.
Kleber, W. (1969), *Einführung in die Kristallographie*, VEB Verlag.
Kleber, W., Meyer, K., Schoenborn, W. (1968), *Einführung in die Krystallophysik*, Acad. Verlag, Berlin.
Kleiner, W. H. (1966), ,,Phys. Rev.", **142**, 318.
Kleiner, W. H. (1969), ,,Phys. Rev.", **182**, 318.
Klimontovici, I. L. (1966), *Kvantovîe gheneratori i nelineinaia optika*, Prosveșcenie.
Konstantinova, A. F., Ivanov, N. R., Greciușnikov, B. N. (1969), ,,Kristallografiia", **14**, 283.
Koptik, V. A. (1958), *Nekotorîe voprosî fenomenologhiceskoi tenzornoi kristallofiziki*, în lucrarea Wooster (1958).
Koptik, V. A. (1960), ,,Kristallografiia", **5**, 932.
Koptik, V. A. (1966), *Șubnikovskie gruppî*, Izd-vo MGU.
Koptik, V. A. (1967), ,,Kristallografiia", **12**, 826.
Kornfeld, M. I., Ciudinov, A. A. (1957), ,,JETF", **33**, 33.
Kostov, I. (1965), *Kristallografiia*, Mir.
Krincik, G. S., Cetkin, M. V. (1969), ,,UFN", **98**, 3.
Krishnan, R. S. (1958), *Progress in Crystal Physics*, vol. I, ed. S. Visvanathan, Madras.
Krishnan, R. S., Radha, E. S. R. (1971), ,,J. Phys. D : Appl. Phys.", **4**, 171.
Krutkov, I. A. (1949), *Tenzor napreajenii i obșcie reșeniia v statike teorii uprugosti*, Izd-vo AN SSSR.
Kuvșinski, E. V., Aero, E. L. (1963), ,,FTT", **5**, 2529.
Landau, L. D. (1937), ,,JETF", **7**, 19, sau (1969), *Sobranie trudov*, t. 1, p. 234, Nauka.
Landau, L. D., Lifșiț, E. M. (1954), *Mehanika sploșnîh sred*, Gostehizdat.
Landau, L. D., Lifșiț, E. M. (1957), *Elektrodinamika sploșnîh sred* Gostehizdat.
Landau, L. D., Lifșiț, E. M. (1963), *Kvantovaia mehanika*, Fizmatghiz.
Landau, L. D., Lifșiț, E. M. (1964), *Statisticeskaia fizika*, Nauka.
Landau, L. D., Lifșiț, E. M. (1965), *Teoriia uprugosti*, Nauka.
Landau, L. D., Lifșiț, E. M. (1967), *Teoriia polea*, Nauka.
Landau, L. D., Lifșiț, E. M. (1969), *Mehanika. Elektrodinamika*, Nauka.
Landolt-Boernstein (1966, 1969, 1971), *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, New Series, Groups III : *Crystal and Solid State Physics*, vol. 1, 2, 3 ; Springer, Berlin-New York.
Landsberg, G. S. (1957), *Optika*, Gostehizdat.
Lehnițki, S. G. (1947), *Anizotropnîe plastinki*, Gostehizdat.
Lehnițki, S. G. (1950), *Teoriia uprugosti anizotropnogo tela*, Gostehizdat.
Lehnițki, S. G. (1971), *Krucenie anizotropnîh i neodnorodnîh sterjnei*, Nauka.
Leibenzon, L. S. (1947), *Kurs teorii uprugosti*, Gostehizdat.
Leibfried, G. (1963), *Mikroskopiceskaia teoriia mehaniceskih i teplovîh svoistv kristallov*, Fizmatghiz.
Lemanov, V. V., Smolenski, G. A. (1972), ,,UFN", **103**, 465.
Lemmlein, G. G. (1934), ,,Tr. Lomonosov. in-ta.", nr. 6, 27.
Levaniuk, A. P., Sannikov, D. G. (1970), ,,FTT", **12**, 2997.
Levaniuk, A. P., Sannikov, D. G. (1971), ,,JETF", **60**, 1109.

Levaniuk, A. P., Sannikov, D. G. (1974), „UFN", **112**, 561.
Lifşiţ, E. M. (1941), „JETF", **11**, 255.
Lifşiţ, I. M., Rozenţveig, L. N. (1947), „JETF", **17**, 783.
Lipson, V., Cocren, G. (1956), *Opredelenie strukturi kristallov*, IL.
Liubarski, G. I. (1957), *Teoriia grupp i eio primenenie v fizike*, Gostehizdat.
Lohin, V. V., Sedov, L. I. (1963), „Prikl. matem. i meh.", **27**, 393, sau în lucrarea Sedov (1970).
Lonsdale, K. (1952), *Kristalli i riotghenovie luci*, IL.
Lure, A. I. (1955), *Prostranstvennie zadaci teorii uprugosti*, Gostehizdat.
Lure, A. I. (1970), *Teoriia uprugosti*, Nauka.
MacConnel, A. J. (1963), *Vvedenie v tenzornii analiz*, Fizmatghiz.
Maloletkin, G. N., Fomin, V. L. (1972), *Tenzornie bazisi v kristallofizike*, Izd-vo LGU.
Mason, W. P. (1952), *Piezoelektriceskie kristalli i ih primenenie v ultraakustike*, IL.
Mason, W. P. (1966), *Crystal Physics of Interaction Processes*, Acad. Press, New York.
Mason, W. P. (1967), *Poluprovodnikovie preobrazovateli*, în lucrarea *Fiziceskaia akustika*, sub red. lui W. P. Mason, t. 1, partea B, p. 139, Mir.
Markovski, V. I., Poluhin, P. I., Şaskolskaia, M. P. (1966), în culegerea *Poleariza-ţionno-opticeskii metod issledovaniia napreajenii*, p. 69, Izd-vo LGU.
Melanholin, N. M. (1970), *Metodi issledovaniia opticeskih sviostv kristallov*, Nauka.
Mihelson, L. M., Sirotin, I. I. (1969), „Kristallografiia", **14**, 573.
Miller, G. F., Musgrave, M. J. P. (1956), „Proc. Roy. Soc.", **A236**, 352.
Minnigerode, B. (1887), „Neues Jahrb. Mineral.", **5**, 145.
Musgrave, M. J. P. (1954), „Proc. Roy. Soc.", **A226**, 356.
Musgrave, M. J. P. (1970), *Crystal Acoustics*, Holden-Day, Inc. Publ., San Francisco.
Mustel, E. R., Parighin, V. N. (1970), *Metodi moduleaţii i skanirovaniia sveta*, Nauka.
Naiş, V. E. (1963), „Izv. AN SSSR, ser. fiz.", **27**, 1496.
Nelson, D. F., Lax, M. (1970), „Phys. Rev. Lett.", **24**, 379.
Neumann, F. (1885), *Vorlesungen uber die Theorie der Elastizität*, Leipzig.
Noks, G., Gold, A. (1970), *Simmetria v tviordom tele*, Nauka.
Novojilov, V. V. (1958), *Teoriia uprugosti*, Sudpromghiz.
Nowacki, W. (1967), „Crystal Data, Amer. Assoc. Crystallogr.", Monograph. nr. 6.
Nye J. (1967), *Fiziceskie svoistva kristallov*, Mir.
Ohmachi, Y., Uchida, N., Niizeki, N. (1972), „J. Acoust. Soc. Amer.", **51**, 1585.
Orlov, R. I. (1936), „Izv. vuzov, Radiofizika", **12**, 1351.
Pace, N. G., Saunders, G. A. (1971), „J. Phys. Chem. Solids", **32**, 1585.
Palmov, V. A. (1964), „Prikl. matem. i meh.", **28**, 401.
Pantulu, P. V., Sudarshan, E. (1970), „J. Phys. C : Solid State Phys.", **3**, 604.
Pecara, A. (1973), *Novii oblik optiki*, Sovetskoe radio.
Perelomova, N. V. (1971), *Uprugost kristallov. Uprughie volni v kristallah*, Izd. Mosk. in-ta stali i splavov.
Perelomova, N. V., Taghieva, M. M. (1972), *Zadacinik po kristallofizike*, Nauka.
Petraşen, M. I., Trifonov, E. D. (1967), *Primenenie teorii grupp v kvantovoi mehanike*, Nauka.
Pine, A. S. (1971), „J. Acoust. Soc. Amer.", **49**, 1026.
Pleşakov, V. F., Sirotin, I. I. (1966), „Prikl. matem. i meh.", **30**, 243.
Pockels, F. (1894), „Abh. Göttingen Ges. d. Wiss.", **39**, 99.
Pockels, F. (1906), *Lehrbukh der Kristallooptik*, Teubner, Leipzig.
Popov, G. M., Şafranovski, I. I. (1972), *Kristallografiia*, Vîssaia şkola.
Ramachandran G. N., Ramaseshan, S. (1961), *Crystal Optics*, Handbuch der Physik, Bd. 25/1, Springer Verlag, Berlin.
Ranganath, G. S. (1972), „Proc. Indian. Acad. Sci.", **A75**, 237.
Ranganath, G. S., Ramaseshan, S. (1969), „Proc. Indian. Acad. Sci.", **A70**, 275.
Raşevski, P. K. (1964), *Rimanova gheometriia i tenzornii analiz*, Nauka.
Rez, I. S. (1967), „UFN", **93**, 633.
Scönflies, A. (1923), *Theorie der Kristallstruktur*, Akad. Verlag, Berlin.
Schubert, M., Wilhelmi, B. (1973), *Vvedenie v nelineinuiu optiku*, partea 1, Mir.

Sedov, L. I. (1962), *Vvedenie v mehaniku sploşnoi sredi*, Fizmatghiz.
Sedov, L. I. (1970), *Mehanika sploşnoi sredi*, t. 1, Nauka.
Shouten, A. I. (1965), *Tenzornii analiz dlea fizikov*, Nauka.
Sirotin, I. I. (1956), „Kristallografiia", **1**, 708.
Sirotin, I. I. (1962), „Kristallografiia", **7**, 82.
Sirotin, I. I. (1965), „Kristallografiia ", **10**, 15.
Sirotin, I. I. (1967), „Kristallografiia", **12**, 208.
Sirotin, I. I. (1974), „Kristallografiia", **19**, 909.
Sirotin, I.I., Mihelson, L.M, (1968) „FTT", **10**, 1843.
Sirotin, I. I., Mihelson, L. M. (1969), „Izv. AN SSSR, ser. fiz.", **33**, 178.
Slater, J. (1967), *Insulators, Semiconductors and Metals*, McGraw-Hill Book Company, Ink.
Smaghin, A. G., Iaroslavski, M. I. (1970), *Piezoelektricestvo kvarţa i kvarţevie rezonatori*, Energhiia.
Smith, G. F. (1962), „Arch. Rational Mech. Anal.", **10**, 108.
Smith, G. F. (1970), „Ann. New York Acad. Sci.", **172**, 57.
Smith, G. F., Kiral, E. (1969), „Rend. Circ. Mat. Palermo", **2**, 18, 5.
Smith, G. F., Rivlin, R. S. (1964), „Arch. Rational Mech. Anal.", **15**, 169.
Smith, G. F., Smith, M. M., Rivlin, R. S. (1963), „Arch. Rational Mech. Anal.", **12**, 93.
Smolenski, G. A., Bokov, V. A., Iusupov, V. A., Krainik, N. N., Pasînkov, R. E., Şur, M. S. (1971), *Segnetoelektriki i antisegnetoelektriki*, Nauka.
Smolenski, G. A., Krainik, N. N. (1968), *Segnetoelektriki i antisegnetoelektriki*, Nauka.
Smolenski, G. A., Pisarev, R. V., Sinii, I. G., Kolpakova, N. N., Titova, A. G. (1972), „Izv. AN SSSR, ser. fiz.", **36**, 1219.
Sonin, A. S., Vasilevskaia, A. S. (1971), *Elektroopticeskie kristalli*, Atomizdat.
Sonin, A. S., Jeludev, I. S. (1959), „Kristallografiia", **4**, 487.
Sonin, A. S., Strukov, B.A. (1970), *Vvedenie v segnetoelektricestvo*, Vîsşaia şkola.
Steenrod, N., Tshinn, W. (1967), *Pervie poneatiia topologhii*, Mir.
Stenon, N. (1958), *O tviordom, estestvenno soderjaşcemsea v tviordom*, Izd-vo AN SSSR.
Suşinski, M. M. (1969), *Spektri kombinaţionnogo rasseianiia molekul i kristallov*, Nauka.
Şafranovski, I. I. (1968), *Lekţii po kristallomorfologhii*, Vîsşaia şkola.
Şaskolskaia, M. P. ş.a. (1969—1972), *Posobie po fiziceskoi kristallografii*, temî 1—7, Izv-vo Mosk. in-ta stali i splavov.
Şcerbakov, V. A. (1972), „Vestn. MGU, ser. fiz. i astronom.", nr. 2, 195.
Şubnikov, A. V. (1940), *Simmetriia (zakoni simmetrii i ih primenenie v nauke, tehnike i prikladnom îskusstve)*, Izd-vo AN SSSR.
Şubnikov, A. V. (1940, a), *Kvarţ i ego primenenie*, Izd-vo AN SSSR.
Şubnikov, A. V. (1949), „Izv. AN SSSR, ser. fiz.", **13**, 347.
Şubnikov, A. V. (1951), *Simmetriia i antisimmetriia konecinih figur*, Izd-vo AN SSSR.
Şubnikov, A. V. (1956), „Kristallografiia", **1**, 95.
Şubnikov, A. V. (1956, a), „UFN", **59**, 591.
Şubnikov, A. V. (1958), *Osnovi opticeskoi kristallografii*, Izd-vo AN SSSR.
Şubnikov, A. V. (1958, a), *Kristalli v nauke i tehnike*, Izd-vo AN SSSR.
Şubnikov, A. V. (1963), „Kristallografiia", **8**, 943.
Şubnikov, A. V., Kopţik, V. A. (1972), *Simmetriia v nauke i iskusstve*, Nauka.
Şubnikov, A. V., Flint, E. E., Boki, G. B. (1940), *Osnovi kristallografii*, Izd-vo AN SSSR.
Şuvalov, L. A. (1959), „Kristallografiia", **4**, 399.
Şuvalov, L. A. (1963), „Kristallografiia", **8**, 617.
Şuvalov, L. A. (1970), „J. Phys. Soc. Japan", **28**, Suppl., 38.
Şuvalov, L. A., Ivanov, N. R. (1964), „Kristallografiia", **9**, 363.
Şuvalov, L. A., Ivanov, N. R., Ciuhladze, O. A., Izrailenko, A. N. (1973), „Kristallografiia", **18**, 1207.

Şcerbakov, V. A. (1972), „Vestn. MGU, ser. fiz. i astronom.", nr. 2, 195.
Tavgher, B.A. (1958), „Kristallografiia", 3, 339.
Tavgher, B. A., Zaiţev, V. I. (1956), „JETF", 30, 564.
Terston, R. (1966), *Rasprostranenie voln v jidkosteah i tverdih telah*, în lucrarea *Fiziceskaia akustika*, sub red. lui W. Mason, t. 1, partea A, p. 13, Mir.
Terston, R. (1967), *Primenenie poluprovodnikovih preobrazovatelei dlea izmereniia deformaţii, uskorenii i smeşcenii*, în lucrarea *Fiziceskaia akustika*, sub red. lui W. Mason, t. 1, partea B, p. 187, Mir.
Turov, E. A. (1963), *Fiziceskie svoistva magnito uporeadocennih kristallov*, Izd-vo AN SSSR.
Uzdalev, A. I. (1967), *Nekotorie zadaci termouprugosti anizotropnogo tela*, Izd-vo Saratovsk. un-ta.
Vaks, V. G. (1973), *Vvedenie v mikroskopiceskuiu teoriiu segnetoelektrikov*, Nauka.
Vakulenko, A. A. (1972), *Polilineinaia alghebra i tenzornii analiz v mehanike*, Izd-vo LGU.
Varikaş, V. M., Haceatrean, I. M. (1969), *Izbrannie zadaci po fizike tviordogo tela*, Vîşeişaia şkola, Minsk.
Vasilev, D. M. (1972), *Fiziceskaia kristallografiia*, Metallurghiia.
Vedam, K., Srinivasan, R. (1967), „Acta crystallogr.", **22**, 630.
Veil, G. (1968), *Simmetriia*, Nauka.
Viswanathan, K. S. (1969), „Indian J. Pure and Appl. Phys.", **7**, 265.
Vinberg, E. B., Gufan, I. M., Sahnenko, V. P., Sirotin, I. I. (1974), „Kristallografiia", **19**, 21.
Vloh, O. G. (1971), Pisma „JETF", **13**, 118.
Voigt, W. (1928), *Lehrbuch der Kristallphysik*, Teubner, Leipzig.
Vonsovski, S. V. (1981), *Magnetismul*, Ed. ştiinţifică şi enciclopedică, Bucureşti.
Voronkova, E. M., Greciuşnikov, B. N., Distler, G. I., Petrov, I. P. (1965), *Opticeskie materiali dlea infrakrasnoi tehniki*, Nauka.
Wigner, E. (1968), *Teoriia grupp*, IL.
Wigner, E. (1971), *Etiudi o simmetrii*, Mir.
Wooster, W. A. (1949), *A Text-Book on Crystal Physics*, Cambridge Univ. Press.
Wooster, W. A. (1958), *Prakticeskoe rukovodstvo po kristallofizike*, IL.
Zagalskaia, I. G., Litvinskaia, G. P. (1973), *Gheometriceskaia kristallografiia*, Izd-vo MGU
Zamorzaev, A. M. (1957), „Kristallografiia", **12**, 15.
Zamorzaev, A. M. (1967), „Kristallografiia", **12**, 819.
Zamorzaev, A. M. (1970), în culegerea *Idei E. S. Fiodorova v sovremennoi kristallografii i mineraloghii*, p. 42, Nauka.
Zarembo, L. K., Krasilnikov, V. A. (1970), „UFN", **102**, 549.

Redactor: VIRGIL SPULBER
Tehnoredactor: CONSTANTIN IORDACHE

Coli de tipar: 47,5. Bun de tipar: 10.08.1981


c. 292 I. P. „Informația"
str. Brezoianu nr. 23—25,
București

62